



Evaluation des effets d'une onde hyperfréquence de forte puissance sur les matériaux à applications optroniques : Application au Hg_{1-x}Cd_xTe

Christophe Palermo

► To cite this version:

Christophe Palermo. Evaluation des effets d'une onde hyperfréquence de forte puissance sur les matériaux à applications optroniques : Application au Hg_{1-x}Cd_xTe. Electronique. Université Montpellier 2, 2004. Français. NNT : . tel-01212995

HAL Id: tel-01212995

<https://theses.hal.science/tel-01212995>

Submitted on 7 Oct 2015

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution - NonCommercial - NoDerivatives| 4.0 International License

T H È S E

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DE MONTPELLIER II

DISCIPLINE : Électronique

FORMATION DOCTORALE : Électronique - composants et systèmes

ÉCOLE DOCTORALE : Information, Structures et Systèmes

Présentée publiquement

par

Christophe PALERMO

**Évaluation des effets d'une onde hyperfréquence de forte puissance sur
les matériaux à applications optroniques : Application au $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$**

Directeur de Thèse :

Jean-Claude VAISSIÈRE

Soutenue le vendredi 29 octobre 2004 devant le jury composé de :

Robert ALABEDRA	Professeur, Université Montpellier II	Président
Jean-Claude VAISSIÈRE	Professeur, Université Montpellier II	Directeur de thèse
Frédéric ANIEL	Professeur, Université Paris Sud	Rapporteur
Jean-Claude DE JAEGER	Professeur, Université Lille I	Rapporteur
Bruno AZAÏS	Docteur, Expert DGA – CEG Gramat	Examineur
Luca VARANI	Chargé de recherches, Université Montpellier II	Examineur

“Si tu viens, par exemple, à quatre heures de l’après-midi, dès trois heures je commencerai d’être heureux. Plus l’heure avancera, plus je me sentirai heureux. À quatre heures, déjà, je m’agiterai et m’inquiéterai : je découvrirai le prix du bonheur !”

Le petit prince, Antoine de Saint-Exupéry

À Magali, mon ange, mon autre,

À mes parents et à mon frère,

À ceux qui sont partis trop tôt,

À tous ceux que j'aime.

Remerciements

Ce travail de thèse s'est déroulé au *Centre d'Electronique et de Micro-optoélectronique de Montpellier* au sein de l'équipe *Modélisation et Génération TeraHertz*.

Je voudrais avant toute chose remercier Monsieur Daniel GASQUET, le directeur du laboratoire, à qui j'exprime toute ma gratitude et ma reconnaissance.

Mes remerciements vont ensuite à ceux qui ont été mes guides tout au long de ces trois années : de par leurs qualités, aussi bien scientifiques qu'humaines, Jean-Claude VAISSIÈRE et Luca VARANI m'ont permis d'avancer sereinement tout au long de ce travail. Je tiens à les remercier pour tous leurs conseils, pour toute leur aide, pour toutes les discussions que nous avons eues sur tant de sujets. Merci aussi pour leur soutien et pour leur confiance. Merci d'avoir toujours été là et de m'avoir tant appris.

Je tiens aussi à remercier le professeur André BOYER qui m'a aidé à mener à bien mon activité d'enseignement et avec qui j'ai pris tant de plaisir à collaborer.

Je voudrais aussi remercier nos collaborateurs de la DGA, Bruno AZAÏS du CEG Gramat et Pascal COULON du CELAR Rennes, qui ont participé à la mise en place de ce sujet et avec qui nous avons pu mener d'intéressantes discussions. Merci aussi à Georges TANTOT du STTC Paris pour l'intérêt qu'il a porté à nos travaux.

Mes remerciements vont aussi à Monsieur Robert ALABEDRA qui m'a fait l'honneur de présider le jury de thèse. Merci aussi à Messieurs Jean-Claude DE JAEGER (IEMN Lille) et Frédéric ANIEL (IEF Paris Orsay) pour l'intérêt qu'ils ont porté à ce travail en acceptant d'en être les rapporteurs.

Je remercie le professeur Lino REGGIANI de l'université de Lecce (Italie), ainsi que nos amis Jevgenij STARIKOV, Pavel SHIKTOROV, et Viktoras GRUŽINSKIS de l'institut de physique des semiconducteurs de Vilnius (Lituanie) pour leur accueil, pour tous les moments agréables, et pour tout ce qu'ils ont apporté, de par leurs connaissances et leur disponibilité, à ce travail.

Je voudrais faire un clin d'oeil à Henri LUQUET et Michel CASTEL, dont je salue la gentillesse et la bonne humeur, mais aussi à Michèle PÉROTIN que je remercie pour ses conseils avisés. Merci aussi à Sylvie JARRIX, à Annick PENARIER et à Philippe NOUVEL pour leur dynamisme et pour toute l'aide qu'ils ont pu et peuvent encore m'apporter. Je remercie également Laurent CHUSSEAU pour toutes nos discussions et pour les différents projets qu'il m'a permis de réaliser.

Je remercie Thierry "Thythy" CONTARET qui, bien que géographiquement éloigné, est toujours présent. Merci Thierry pour ta bonne humeur, pour ta gentillesse et ton amitié.

Merci aussi à tous les compagnons de travail : Laurent CERUTTI, Gérard FERBLANTIER, Maxime MARCHETTI, Jean-Philippe PEREZ, Mikhaël MYARA, Antoine TOUBOUL, Cédric LEYRIS, Jean-François MILLITHALER, Cédric CHLUDA et Abraham AKWOUE. Merci à Jean-François CARLOTTI, le compagnon de mes longues nuits de rédaction, qui, ne lui en déplaise, a le cœur sur la main.

Je remercie tous les copains et amis qui, de près ou de loin, ont fait partie de cette aventure et avec qui il est si bon de passer un moment : merci à Sylviane ANDREANI, Philippe BOULET, Pierre et Michelle CERENZIA, Johanna COHEN, Delphine DELAS ainsi qu'à toute la famille MONZO. Merci aussi à Alex NGOUANGA, Olivier NICOLAS, Frédéric PEÑAS, Julien ROSET, Nicolas SAURY, Didier SCHWAB, Olivier SERRE, Luca et Joëlle VANDERSPELDEN ainsi qu'à Nathalie VINUESA.

Mes amitiés vont aussi vers Jeanine VAISSIÈRE ainsi que vers Monica, Martina et Sofia VARANI.

Je ne terminerai pas ces remerciements sans avoir cité les êtres qui me sont les plus chers, en commençant par mes parents, sans qui je n'aurais jamais pu arriver jusque là. Papa, Maman, merci à vous deux d'avoir tout fait pour que je puisse réussir. Merci de m'avoir toujours poussé tout en me laissant choisir. Merci à Florian, mon petit frère qui, un matin de juillet, est venu apporter un rayon de soleil supplémentaire. De tout mon coeur, merci à vous trois et à tous ceux de la famille qui, comme vous, ont aimé à y croire.

Je remercie également ma future belle-famille : Danièle, Pierre et Aude, qui m'ont toujours voué un soutien et une confiance indéfectibles. Merci d'être là, même si vous êtes loin. Merci à toi Rahal pour ta sympathie et ta bonne humeur.

Je fais un clin d'oeil à Guilhem SERVEL, l'ami, le témoin de tant d'aventures. Mes pensées vont aussi vers Fleur VANDAELE et MinhSon NGUYEN, mes amis d'enfance, ainsi que vers leurs familles.

Je voudrais par dessus tout exprimer toute ma gratitude et tout mon amour à Magali, qui deviendra bientôt mon épouse, et lui dire combien tout aurait été plus difficile sans elle. Présente dans les bons moments comme dans les instants de doute, tu as su m'apporter avec douceur, patience et gentillesse un soutien confortable et apaisant. Merci, mon ange, de m'avoir aidé à me relever après chaque chute. Merci de m'avoir toujours offert et de m'offrir encore une oreille attentive. Merci d'être près de moi.

J'ai, enfin, une pensée pour ma grand-mère à qui je pense beaucoup et qui, aujourd'hui encore, me manque.

Table des matières

Table des matières	xii
Table des symboles	xiii
Introduction Générale	1
1 Généralités sur la photodétection et propriétés du HgCdTe	7
Introduction	8
1.1 La rencontre de plusieurs domaines	8
1.1.1 Des micro-ondes pour tout faire	8
1.1.2 Électronique et compatibilité électromagnétique	10
1.1.3 La photodétection infrarouge	12
1.1.4 La génération électronique indésirable et le courant d'obscurité	17
1.2 Le tellure de mercure et de cadmium	18
1.2.1 La place du tellure de mercure et de cadmium dans la photodétection infrarouge	18
1.2.2 Propriétés physiques du tellure de mercure et de cadmium	20
1.2.3 Le $\text{Hg}_{0.795}\text{Cd}_{0.205}\text{Te}$ (MCT)	28
1.2.4 La dégénérescence dans le MCT	32
1.2.5 Les processus de recombinaison	35
1.2.6 La génération électronique dans le MCT	42
Conclusion	47

2	Le transport électronique : théorie et modèles	49
	Introduction	50
2.1	Simulation du transport électronique dans les semiconducteurs	51
2.1.1	La fonction de distribution et l'équation de Boltzmann	51
2.1.2	Les équations des moments	56
2.1.3	L'équation de Poisson	59
2.2	Méthodes de modélisation et de simulation du transport électronique	60
2.2.1	Le modèle dérive-diffusion	61
2.2.2	Le modèle hydrodynamique	64
2.2.3	La méthode de Monte Carlo	66
2.3	Les processus de collision et les différentes interactions dans le MCT à l'usage de la méthode de Monte Carlo	70
2.3.1	Les taux de transitions entre deux états	71
2.3.2	Prise en compte de la dégénérescence	74
2.3.3	Probabilités de collisions	74
2.3.4	États après collisions	82
2.4	Modélisation des processus de génération-recombinaison dans le MCT	84
	Conclusion	86
3	Étude du régime statique	87
	Introduction	88
3.1	Les probabilités de collision	89
3.2	Calcul de la fonction de distribution et des paramètres cinétiques	90
3.2.1	La fonction de distribution	92
3.2.2	L'énergie moyenne	94
3.2.3	La vitesse de dérive	98
3.2.4	La mobilité	101
3.2.5	La masse effective moyenne	104
3.2.6	Taux de relaxation de la vitesse et de l'énergie	107

3.2.7	Grandeurs transitoires	109
3.3	Évolution de la densité de porteurs	111
3.3.1	Détermination préalable des paramètres P_{ii} et ψ	113
3.3.2	Détermination du taux de génération g	113
3.3.3	Résolution de l'équation balance	116
3.4	Etude du bruit	123
3.4.1	Fonction d'autocorrélation et densité spectrale de bruit de diffusion .	124
3.4.2	Coefficient et longueur de diffusion	130
	Conclusion	134
4	Étude du régime dynamique	137
	Introduction	137
4.1	Étude du régime petit-signal	139
4.1.1	La théorie de la réponse linéaire	140
4.1.2	Détermination de la fonction de réponse et de la mobilité différentielle à l'aide du modèle hydrodynamique	141
4.2	Étude du régime grand-signal	150
4.2.1	Signal harmonique	151
4.2.2	Impulsions	160
4.2.3	Trains d'impulsions	163
4.2.4	Impulsions hyperfréquence	167
4.2.5	Trains d'impulsions hyperfréquence	168
	Conclusion	171
	Conclusion Générale	175
A	Méthodes de tirage au sort de nombres aléatoires selon une distribution de probabilité	179
A.1	La méthode directe	179
A.2	La méthode du rejet ou de von Neumann	181

B Algorithmes spécifiques au calcul des variables	183
B.1 Calcul de la vitesse de dérive	183
B.2 Calcul de l'énergie moyenne	184
B.3 Calcul de la masse effective moyenne dans la direction du champ électrique .	184
C Méthode d'expression analytique de la mobilité différentielle en fréquence	187
Bibliographie	195
Liste des titres et travaux	203
1 Communications relatives à ces travaux de thèse	203
2 Communications annexes	204
3 Contrats et programmes de collaboration	206

Table des symboles

Symbole	Grandeur	Valeur dans le MCT
\mathbf{a}	Vecteur accélération	
a	Paramètre de maille	4.464 Å
α	Coefficient de non-parabolicité	10.4 eV ⁻¹
c	Vitesse de la lumière dans le vide	3×10^8 m/s
\mathcal{C}	Capacité calorifique	0.05
$C_{\delta v}$	Fonction d'autocorrélation de la vitesse	
$c_{\delta v}$	$C_{\delta v}$ normalisée	
D	Coefficient de diffusion	
Δ	Énergie de split-off	1 eV
ΔT	Échauffement	
Δn	Variation de la densité d'électrons	
Δp	Variation de la densité de trous	
$\delta(t)$	Fonction de Dirac	
$\overline{\delta \mathbf{v}^2}$	Variance des fluctuations de la vitesse	
$\overline{\delta v^2}$	Variance des fluctuations de la vitesse	

$\overline{\delta \mathbf{v} \delta \epsilon}$	Covariance des fluctuations de la vitesse et de l'énergie	
Δt	Pas sur le temps	10^{-14} s
$\Delta \epsilon_c$	Offset des bandes de conduction	1.55 eV
$\Delta \epsilon_g$	Différence de gap	1.9 eV
$\Delta \epsilon_v$	Offset des bandes de valence	-350 meV
\mathbf{E}	Vecteur champ électrique	
E	Champ électrique	
e	Charge élémentaire	1.6×10^{-19} C
E_h	Amplitude du champ harmonique	
E_s	Composante continue du champ électrique	
ϵ	Énergie	
$\bar{\epsilon}$	Énergie moyenne des électrons	
ϵ_0	Énergie électronique moyenne à champ nul	
ϵ_a	Énergie des niveaux accepteurs	
ϵ_c	Minimum d'énergie de la bande de conduction	
ϵ_d	Énergie des niveaux donneurs	
ϵ_f	Niveau de Fermi	
ϵ_g	Largeur de bande interdite	91 meV
ϵ_L	Gap Γ -L	$\simeq 1.5$ eV
ϵ_{op}	Énergie du phonon optique polaire	
ϵ_{ph}	Énergie du photon	

ϵ_R	Énergie de seuil pour la recombinaison Auger	93 meV
ϵ_{th}	Énergie de seuil pour l'ionisation par impact	92 meV
ϵ_v	Maximum d'énergie de la bande de valence	
ϵ_X	Gap Γ -X	$\simeq 3$ eV
f	Fréquence de perturbation	
$f(\mathbf{k})$	Fonction de distribution	
$f(\epsilon)$	Fonction de distribution en énergie	
G	Gain de l'antenne	
$G(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$	Facteur de recouvrement	
g	Taux de génération Auger	
Γ	Vallée Γ	
Γ_R	Matrice de relaxation	
$\gamma(\epsilon)$	Relation de dispersion de la bande de conduction	$\epsilon(1 + \alpha\epsilon)$
h	Constante de Planck	6.62×10^{-34} J.s
\hbar	Constante réduite de Planck	1.054×10^{-34} J.s.rad $^{-1}$
H	Hamiltonien du système	
H_0	Hamiltonien non-perturbé	
H'	Hamiltonien de la perturbation	
I	Courant	
i	Mode optique	1 (CdTe) ou 2 (HgTe)
\mathbf{J}	Vecteur densité de courant	
J	Densité de courant	

$ \mathbf{k}\rangle$	État initial	
$ \mathbf{k}'\rangle$	État final	
k	Module de \mathbf{k}	
k_x	Composante de \mathbf{k} dans la direction x	
k_B	Constante de Boltzmann	1.38×10^{-23} J/K
$K_v(t)$	Fonction de réponse de la vitesse	
κ	Constante diélectrique	
κ_0	Permittivité du vide	$\frac{1}{36\pi} 10^{-9}$ F/m
κ_i	Contribution à la constante diélectrique du mode i	
κ_∞	Constante diélectrique relative hautes fréquences	9.8
κ_r	Constante diélectrique relative statique	13.7
L_D	Longueur de diffusion	
λ_c	Longueur d'onde de cut-off	$14 \mu\text{m}$
λ_{max}	Longueur d'onde d'émission maximale du corps noir	
MCT	$\text{Hg}_{0.795}\text{Cd}_{0.205}\text{Te}$	
\mathcal{M}	Masse molaire	310 g
m^*	Masse effective moyenne	
	dans la direction du champ électrique	
m_e^*	Masse effective électronique	
	dans la direction du champ électrique	
m_c	Masse effective des électrons en fond de vallée Γ	0.007
m_0	Masse de l'électron libre	9.109×10^{-31} kg

m_{lh}	Masse effective des trous légers	0.007
m_{hh}	Masse effective des trous lourds	$0.4 \leq m_{hh} \leq 0.7$
μ	Mobilité de corde	
μ_e	Mobilité des électrons	$\sim 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$
μ_h	Mobilité des trous	$\leq 500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$
μ'	Mobilité différentielle basse fréquence	
μ'_ϵ	$d\bar{\epsilon}/dE$	$\sim 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$
μ'_i	Partie imaginaire de la mobilité différentielle	
μ'_r	Partie réelle de la mobilité différentielle	
N_A	Densité d'accepteurs	
N_{cat}	Densité de cations	$1.48 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$
N_D	Densité de donneurs	
N_{op}	Population de phonons	
n	Densité électronique	
n_0	Densité électronique à champ nul	
n_I	Densité d'impuretés ionisées	
n_i	Densité intrinsèque de porteurs	$5.75 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$
n_s	Densité électronique en régime stationnaire	
ν_ϵ	Taux de relaxation de l'énergie	
ν_+	Taux de relaxation généralisé	
ν_-	Taux de relaxation généralisé	
ν_R	Taux de relaxation généralisé (partie réelle)	

ν_v	Taux de relaxation de la vitesse	
ω	Pulsation	
ω_0	Taux de relaxation généralisé (partie imaginaire)	
ω_{LO_1}	Pulsation du phonon longitudinal, mode CdTe	$2.92 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$
ω_{LO_2}	Pulsation du phonon longitudinal, mode HgTe	$2.62 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$
ω_{op_1}	Pulsation du phonon optique polaire, mode CdTe	$2.92 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$
ω_{op_2}	Pulsation du phonon optique polaire, mode HgTe	$2.62 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$
ω_{ph}	Pulsation du phonon	
ω_{TO_1}	Pulsation du phonon transverse, mode CdTe	$2.81 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$
ω_{TO_2}	Pulsation du phonon transverse, mode HgTe	$2.28 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$
P	Élément de matrice de Kane	$8.28 \times 10^{-10} \text{ eVm}$
$P(\epsilon)$	Taux de collision pour l'énergie ϵ	
$P(\theta)$	Probabilité pour que l'angle de déflexion vaille θ	
P_e	Puissance émise par le radar	
P_{ii}	Paramètre pour l'ionisation par impact	10^{12} s^{-1}
P_s	Puissance traversant le semiconducteur	
\mathbf{p}	Vecteur quantité de mouvement	
p	Densité de trous	
p_0	Densité de trous à champ nul	
p_s	Densité de trous en régime stationnaire	
p_x	Composante selon la direction x de \mathbf{p}	
ϕ	Azimut	

ψ	Paramètre pour l'ionisation par impact	3
Q	Quantité de chaleur	
q	Charge électrique	
\mathbf{q}	Vecteur d'onde du phonon	
q_s	Longueur d'écran	
R_s	Résistance du semiconducteur	
r	Distance	
\mathbf{r}	Position	
ρ	Masse volumique du matériau	7.3 g/cm ³
$\rho(\mathbf{r}, t)$	Densité de charges	
R	Coefficient de recombinaison Auger	10 ⁻²⁴ cm ⁶ s ⁻¹
R_{Auger}	Taux de recombinaison Auger	
$R_{\text{Radiative}}$	Taux de recombinaison radiative	
r_0, r_1, r_2	Nombres aléatoires	entre 0 et 1
$S_{\delta v}$	Densité spectrale de bruit de diffusion	
T	Température du réseau	77 K
T_c	Température du corps noir	
T_e	Température électronique	
T_N	Température de bruit	
t		
τ_c	Temps de collision	
τ_e	Temps de relaxation de l'énergie	

τ_v	Temps de relaxation de la vitesse	
θ	Angle de déflexion	
$\theta(t)$	Fonction de Heaviside	
θ_{op}	Température du phonon optique polaire	
$u(\lambda, T)$	Densité spectrale d'énergie rayonnante du corps noir	
$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$	Fonction de Bloch de l'état \mathbf{k}	
u_i	Fraction ionisée	
$V(\mathbf{q})$	Élément de la matrice de transition	
$V(r)$	Potentiel coulombien	
\mathbf{v}	Vecteur vitesse	
v	Vitesse	
\bar{v}	Vitesse de dérive	
$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$	Probabilité de transition de l'état $ \mathbf{k}\rangle$ vers l'état $ \mathbf{k}'\rangle$	
x	Proportion de cadmium	0.205
Z	Quantité de charges par impureté	1

Introduction générale

Au début du siècle dernier, Max Planck réconciliait les travaux de Rayleigh et Jeans avec ceux de Wien et finissait de décrire le lien qui existe entre la couleur d'un corps et sa température. En effet, il n'est pas rare d'entendre parler de la chaleur d'une lumière, de métaux portés au rouge ou encore chauffés à blanc. Toutefois, si nos yeux ne sont sensibles qu'aux rayonnements des objets les plus chauds, tout corps dont la température n'est pas absolument nulle émet dans le domaine infrarouge. La présence de fenêtres atmosphériques de transmission dans cette gamme de fréquences ouvre par conséquent des perspectives importantes en terme de vision nocturne et de thermographie à qui peut en détecter les ondes et déterminer leur distribution spectrale.

Les multiples possibilités qu'offre la photodétection infrarouge ont rendu celle-ci incontournable dans un vaste champ de domaines dont les principaux segments sont les applications militaires, le contrôle non-destructif et l'imagerie médicale. Le tellurure de mercure et de cadmium ($\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$) est un matériau très utilisé pour la détection des longueurs d'ondes du spectre infrarouge. En effet, cet alliage semiconducteur ternaire de type II-VI présente un gap pouvant être ajusté de façon continue entre 0 et 1.6 eV, et ce par le biais de la composition stoechiométrique. Il peut de fait être utilisé pour la fabrication de photodétecteurs opérant dans les différentes fenêtres atmosphériques du domaine infrarouge. En même temps, le paramètre de maille du $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ne varie que très peu avec la fraction de cadmium, ce qui permet la production du matériau dans ses différentes compositions à partir d'une seule et même filière technologique et ouvre des perspectives intéressantes pour le développement d'applications de photodétection multispectrale.

Historiquement, le tellure de mercure et de cadmium fut introduit vers 1960 dans sa composition à 20.5 % de cadmium. Il constituait alors le premier matériau semiconducteur capable d’opérer de façon intrinsèque, et par conséquent à la température de l’azote liquide, dans la fenêtre LWIR (Long Wavelength InfraRed). L’émission des corps portés à température ambiante étant maximale dans cette bande spectrale, le $\text{Hg}_{0.795}\text{Cd}_{0.205}\text{Te}$ (MCT) présente un intérêt fondamental pour les applications de vision nocturne, et c’est plus particulièrement vers lui que se tournent ces travaux de thèse.

À l’image de la photodétection infrarouge, la génération micro-onde est étudiée et développée de par le monde, et ses applications se font de plus en plus nombreuses. En effet, en offrant des fréquences suffisamment élevées pour transporter un flux d’informations considérable, et à la fois suffisamment faibles pour permettre leur propagation sans encombre à travers l’atmosphère terrestre, les hyperfréquences jouent, à l’heure des connexions à hauts débits et des liaisons sans fils, un rôle majeur. Toutefois, si le monde des télécommunications semble être aujourd’hui le moteur des applications hautes fréquences, les domaines civil, militaire et médical restent très demandeurs de ces technologies toujours mieux maîtrisées et toujours plus présentes.

En même temps, l’électronique prend une importance grandissante dans les équipements actuels au point d’assurer, dans de nombreux cas, des fonctions demandant une haute fiabilité telles que la gestion de vol d’un avion ou le système de freinage d’une voiture. Toutefois, si, au même titre que les hyperfréquences, la microélectronique apporte à chaque jour sa part de progrès, l’omniprésence de chacun de ces deux domaines pose d’importants problèmes de compatibilité. En effet, les micro-ondes, de par leur nature électromagnétique, peuvent plus ou moins influencer le comportement des systèmes électroniques.

Cette interaction indésirable a conduit à de nombreuses études et à la mise en place de normes de compatibilité électromagnétique cherchant à réduire l’émissivité des dispositifs tout en augmentant leur tolérance aux radiations. Cependant, bien que de nombreux travaux aient été menés pour améliorer la protection des systèmes, très peu de résultats ont été publiés concernant les effets physiques engendrés par les micro-ondes dans les semiconducteurs. Or, si

la plupart des composants est en général bien protégée des agressions extérieures, notamment par des systèmes de blindage et de filtrage, certains dispositifs tels que les photodétecteurs restent exposés aux rayonnements, de par leur positionnement derrière une fenêtre. L'étude et la description de l'action des ondes électromagnétiques sur les matériaux à applications optroniques s'avèrent par conséquent nécessaires et constituent l'objectif de nos travaux.

Le courant d'obscurité qui traverse un photodétecteur est généralement rendu négligeable devant le flux de charges photo-générées, si bien que le comportement du courant mesuré à la sortie du capteur est assimilé à celui de la luminosité de la scène observée. Dans ces conditions, une augmentation de courant ne trouvant pas sa source dans un éclairage plus important ne saurait être interprétée correctement, provoquant ainsi un éblouissement du dispositif. En ce sens, des travaux ayant par le passé mis en évidence une brutale augmentation de la densité de courant traversant le MCT sous l'effet de champs électriques d'environ 200 V/cm laissent entrevoir une possible perturbation de la photodétection par un rayonnement hyperfréquence de forte puissance. En effet, bien que les photons associés aux micro-ondes ne soient pas suffisamment énergétiques pour pouvoir participer aux processus de photo-génération de porteurs libres, celles-ci induisent, au sein du matériau qu'elles irradient, un champ électrique dont l'amplitude peut, dans certains cas, avoisiner la valeur critique évoquée précédemment.

L'objectif de ce travail de thèse, financé par la Délégation Générale pour l'Armement (DGA) et le Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), est d'évaluer dans quelle mesure et sous quelles conditions un rayonnement hyperfréquence de forte puissance est capable de perturber le comportement électronique du MCT. Il s'agit par conséquent de comprendre et de décrire les effets physiques et les phénomènes transitoires apparaissant lorsque la distribution des porteurs est hors-équilibre. Pour ce faire, nous développons un modèle théorique prenant en compte les différents phénomènes microscopiques influençant le transport de charges dans le matériau d'intérêt en nous appuyant sur des méthodes de simulation ayant déjà fait leurs preuves par ailleurs.

Nous donnerons dans le *premier chapitre* une description du mécanisme de photodétection,

après que le contexte dans lequel se situe notre travail ait été rappelé. Les propriétés physiques du tellurure de mercure et de cadmium seront abordées, et nous prêterons une attention toute particulière à celles du MCT. Le phénomène de dégénérescence sera lui aussi décrit et nous verrons sous quelles conditions ses effets ne peuvent plus être négligés. Enfin, les phénomènes de génération-recombinaison, qui jouent un rôle prépondérant dans le MCT, seront détaillés et nous verrons que ceux-ci peuvent être ramenés aux seuls processus Auger.

Le *deuxième chapitre* sera dédié à la mise en place d'un modèle théorique permettant de simuler le comportement électronique du MCT, à la fois en régime statique et dynamique. Nous verrons que, dans un matériau semiconducteur, le transport électronique est décrit par l'équation de Boltzmann, et nous citerons diverses méthodes permettant d'en approcher de plus ou moins près les solutions. Plus particulièrement, les méthodes dérive-diffusion (DD) et hydrodynamique (HD), permettant une simulation macroscopique du transport de charges, ainsi que la méthode microscopique de Monte Carlo (MC) seront décrites. Un modèle adapté au calcul des paramètres de transport prenant notamment en compte les effets de génération-recombinaison sera alors mis en place à partir des différents paramètres physiques dont nous disposons.

Par la suite, nous mènerons, dans le *chapitre 3*, une étude statique qui nous permettra d'évaluer l'influence respective des différents effets physiques mis en jeu, ainsi que d'en donner leurs caractéristiques. En même temps, la description des régimes stationnaire et transitoire nous permettra d'optimiser nos outils de simulation, à travers une comparaison avec des résultats expérimentaux issus de la littérature, et de permettre leur utilisation pour l'étude du régime dynamique. Nous calculerons les différents paramètres cinétiques, que sont la vitesse de dérive, l'énergie moyenne et la mobilité, et modéliserons l'évolution dans le temps de la densité électronique sous l'effet des processus Auger. La fin de ce chapitre sera dédiée au bruit, thème de recherche de prédilection du Centre d'Electronique et de Micro-optoélectronique de Montpellier (CEM2). Le coefficient de diffusion, cher aux simulateurs macroscopiques, ainsi que la température de bruit, mesurable expérimentalement, seront alors calculés.

Enfin, le *chapitre 4* abordera l'étude dynamique. Dans un premier temps, le régime petit-

signal sera décrit et nous permettra de déterminer le comportement fréquentiel du matériau tout en reliant celui-ci à la dynamique des porteurs libres. Puis, le régime grand-signal sera à son tour étudié et la réponse des porteurs libres à différentes formes d'ondes sera simulée. Des champs électriques harmoniques mais aussi des impulsions et des trains d'impulsions de fortes amplitudes, pouvant par exemple être émis par un radar, seront considérés. Nous porterons une attention particulière à l'évolution dans le temps de la densité électronique afin de déterminer sa sensibilité aux différents paramètres de la perturbation (fréquence, durée d'impulsion, taux de répétition, etc.) et d'en extraire, par là-même, les plus importants.

Chapitre 1

Généralités sur la photodétection et propriétés du HgCdTe

Sommaire

Introduction	8
1.1 La rencontre de plusieurs domaines	8
1.1.1 Des micro-ondes pour tout faire	8
1.1.2 Électronique et compatibilité électromagnétique	10
1.1.3 La photodétection infrarouge	12
1.1.4 La génération électronique indésirable et le courant d'obscurité	17
1.2 Le tellure de mercure et de cadmium	18
1.2.1 La place du tellure de mercure et de cadmium dans la photodétection infrarouge	18
1.2.2 Propriétés physiques du tellure de mercure et de cadmium	20
1.2.3 Le $\text{Hg}_{0.795}\text{Cd}_{0.205}\text{Te}$ (MCT)	28
1.2.4 La dégénérescence dans le MCT	32
1.2.5 Les processus de recombinaison	35
1.2.6 La génération électronique dans le MCT	42
Conclusion	47

Introduction

La multiplication des systèmes civils et militaires fonctionnant dans le domaine des micro-ondes pose des problèmes de compatibilité électromagnétique. Si le blindage des dispositifs permet dans un grand nombre de cas de s'y soustraire, ce genre de techniques ne peut être utilisé dans le cas de la photodétection infrarouge où les composants électroniques doivent être exposés aux rayonnements extérieurs : l'évaluation des effets des micro-ondes sur les matériaux à applications optroniques présente donc un grand intérêt.

C'est dans le but de situer correctement ce travail que nous présentons la place respective de la génération micro-onde, de la microélectronique et de la photodétection infrarouge, dont nous décrivons le principe de fonctionnement. Notre attention se porte plus particulièrement sur le cas du tellurure de mercure et de cadmium, un matériau très utilisé pour la fabrication de photodétecteurs infrarouge. Après en avoir retracé l'histoire, nous en présentons les caractéristiques physiques afin de pouvoir mettre en place un modèle adéquat, capable de rendre compte du comportement électronique du matériau et des phénomènes physiques qui s'y produisent.

1.1 La rencontre de plusieurs domaines

1.1.1 Des micro-ondes pour tout faire

Si, au premier abord, les micro-ondes évoquent essentiellement des fours à cuisson rapide, elles trouvent leur place dans des applications toujours plus nombreuses, allant bien au delà du domaine domestique. Situées entre les ondes radios et l'infrarouge, elles font référence au spectre de fréquences s'étalant de 300 MHz à 300 GHz et correspondant à des longueurs d'ondes situées entre 1 mm et 1 m. Si ces chiffres ne paraissent *a priori* pas très explicites, ils sont pourtant l'expression d'un compromis idéal entre des longueurs d'ondes assez longues pour permettre une propagation sans encombre dans l'atmosphère et des fréquences assez élevées pour offrir un excellent débit d'informations. De telles ondes ne pouvant être qu'une aubaine pour les télécommunications, elles ont vite fait d'envahir notre vie quotidienne en

débouchant sur des applications grand-public telles que le réseau GSM (Global Standard for Mobile) ou bien plus récemment les réseaux dits *wireless* comme le Wi-Fi (wireless fidelity) ou le Bluetooth. Cependant, beaucoup de chemin a été parcouru avant que l'on en vienne à couper les fils du téléphone et, depuis leur découverte par Hertz en 1888, l'invention du magnétron en 1920 et les premières études de la propagation des micro-ondes dans des tuyaux en cuivre par ceux que l'on appelaient pour le coup "les plombiers", une multitude d'applications a vu le jour.

La première application concrète des micro-ondes fût militaire et n'était pas destinée à transporter des informations mais plutôt à scruter l'horizon. En 1940, le radar apparaissait à travers l'utilisation de ces ondes qui, par leurs longueurs centimétriques, permettent de faire des mesures précises de télémétrie. Mais bien vite, les utilisateurs de la technologie micro-ondes furent confrontés à des phénomènes pour le moins inattendus puisque ces ondes étaient capables de produire de la chaleur. Dès lors, elles pouvaient avoir d'autres applications que la détection de l'aviation ennemie. Après la guerre elles n'eurent de fait pas de mal à élargir leur champ d'applications. Capables de chauffer rapidement et en profondeur par excitation des molécules d'eau, les micro-ondes excellent là où bien d'autres modes de chauffage sont moins efficaces : au delà d'une utilisation culinaire, elles sont de nos jours utilisées comme méthode de cuisson ou de séchage dans le milieu industriel et permettent l'échauffement local des lésions (hyperthermie focale, technique de coagulation par micro-ondes, etc.) dans le milieu médical.

Parallèlement à cela, les domaines militaire, civil mais aussi spatial ont continué à exploiter les possibilités de communication offertes par ces ondes capables de traverser l'ionosphère et permettant de fait de communiquer avec les satellites, navettes et autres sondes spatiales. Si l'on peut dire sans trop se tromper que c'est en grande partie grâce à elles que Neil Armstrong a pu marcher sur la Lune et que l'on a pu quelques années plus tard découvrir le sol de la planète Mars, les micro-ondes s'illustrent dans un registre plus terrestre dans le cadre de systèmes d'aide à la navigation et de positionnement tels que les balises ou le réseau GPS

(Global Positioning System). Elles sont aussi utilisées dans le domaine de l'aviation civile pour la régulation du trafic aérien ainsi que pour l'aide à l'atterrissage en conditions de mauvais temps.

De nos jours toutes ces applications coexistent, et bien d'autres encore les accompagnent. La génération de micro-ondes est une technologie maîtrisée et réalisable à partir de dispositifs dont les dimensions géométriques sont de l'ordre du centimètre. Le faible encombrement des générateurs hyperfréquence, associé à des puissances consommées de plus en plus faibles, offre une facilité d'intégration dans un grand nombre de systèmes embarqués ou portatifs. Les fréquences d'émission sont de plus en plus élevées afin de permettre des débits d'informations toujours meilleurs : à présent, les yeux se tournent vers le domaine du TeraHertz, situé à la frontière entre les micro-ondes et l'infrarouge. Tout cela fait des hyperfréquences une source d'énergie omniprésente, si bien que l'on finit par parler de pollution électromagnétique et par les retrouver périodiquement au centre de polémiques concernant la nature des effets qu'elles ont sur leur entourage.

1.1.2 Électronique et compatibilité électromagnétique

Parallèlement aux micro-ondes, l'électronique prend une place de plus en plus grande. En effet, de par le coût relativement faible (le silicium est après l'oxygène le constituant le plus répandu sur terre), la flexibilité, et le faible encombrement qu'elle offre, rares sont devenus les systèmes modernes où elle n'est pas présente. Sa généralisation est telle que les fonctions demandant une haute fiabilité sont désormais assurées par des calculateurs associés à des transmissions électriques. Ainsi, la stabilité de l'airbus A 320 est-elle gérée par des ordinateurs de bord quand les systèmes de sécurité automobiles tels que l'AirBag, l'ABS (Antilock Bracking System), ou le contrôle de l'accélération sont assurés par des dispositifs électroniques.

Depuis la découverte du transistor en 1947 par John Bardeen, Walter Brattain et Robert Shockley, la recherche de performances et de portabilité des systèmes électroniques entraîne

une miniaturisation incessante des composants dont le nombre par unité de surface double tous les dix-huit mois, en accord avec la loi de Moore. Si cette réduction continue des dimensions permet un accroissement de la rapidité et une réduction de la consommation des dispositifs électronique, elle les rend par la même occasion de plus en plus sensibles aux perturbations électriques. Ainsi, si l'on ne prend pas les précautions nécessaires, il est possible de provoquer la destruction d'un composant moderne par décharge électrostatique, uniquement en le touchant. Mais le problème de ce que l'on appelle la *compatibilité électromagnétique* (CEM) des systèmes n'est pas nouveau et, dès les premières installations d'émetteurs radio, on s'est aperçu que ceux-ci se perturbaient entre eux. Aujourd'hui, les fréquences radiophoniques ont été réglementées et les vélomoteurs ne perturbent plus la réception des téléviseurs. Pourtant, il suffit de laisser un téléphone portable à proximité d'un téléviseur pour ne pas tarder à remarquer que tous les problèmes de compatibilité ne sont pas réglés et que l'électronique ne reste pas insensible aux rayonnements hyperfréquences. Ainsi, la compatibilité électromagnétique ne connaît pas de limites clairement définies et l'on est amené, au fur et à mesure de l'évolution technologique, à prendre en compte des sources de rayonnement qui pouvaient être négligées auparavant.

Remarquons que, à côté de ces agressions dites *industrielles* car directement liées à l'activité humaine, il existe des *agressions naturelles* telles que l'orage ou la foudre, qui sont pour le moins incontrôlables et qu'il ne faut pas négliger. En effet, un orage peut engendrer un champ électrique de l'ordre de 10 V/cm à quelques centaines de mètres [Degauque et Hamelin, 1990]. Toutefois, malgré les apparences et en dépit de l'extraordinaire puissance que peut dégager un orage, le bruit d'origine industrielle est bien plus important que celui d'origine naturelle. Concrètement, si l'on prend l'exemple d'un radar, le champ électrique que l'émetteur crée à une distance r vérifie la relation [Badoual *et al.*, 1993] :

$$E = \frac{\sqrt{60 \times G \times P_e}}{r} \quad (1.1)$$

où G est le gain de l'antenne radar et P_e la puissance émise. En prenant $G = 50$ dB et

$P_e = 1$ MW, on obtient un champ électrique de l'ordre de 250 V/cm à une distance de 100 m. Il va de soit que de tels champs électriques rendent possible la destruction ou du moins la perturbation de systèmes électroniques peu ou pas protégés. Ce dernier aspect est d'ailleurs intéressant d'un point de vue stratégique puisqu'il laisse entrevoir la possibilité de mettre au point de nouveaux outils à usage militaire visant à nuire à la logistique de l'ennemi en interrompant de façon momentanée ou définitive ses communications, ses échanges de données, ou bien en provoquant la défaillance de ses appareils de mesure et systèmes de commande.

En vertu de ce que nous avons vu précédemment il est indispensable, tant dans le domaine industriel que dans le domaine militaire, de protéger les dispositifs électroniques en les isolant autant que faire se peut des rayonnements électromagnétiques. Toutefois, s'il est possible d'enfermer la plupart des composants électroniques dans des boîtiers de blindage, les photodétecteurs, de par leur fonction de capteurs de lumière, ne peuvent être cachés et doivent être exposés aux radiations. Dans ce cas, l'interaction entre des micro-ondes incidentes et le matériau semiconducteur risque fort de poser des problèmes. En ce sens, l'étude des effets des hyperfréquences de forte puissance sur les semiconducteurs à applications optroniques, que nous nous proposons de faire dans ce travail de thèse, présente un intérêt fondamental. Pour l'heure, peu de résultats ont été publiés concernant les effets physiques engendrés au niveau du matériau par une telle interaction. Dans ce travail, nous nous intéressons au cas de la photodétection infrarouge, sur laquelle nous nous arrêtons à présent.

1.1.3 La photodétection infrarouge

1.1.3.1 Les intérêts de la technologie infrarouge

Selon leurs fréquences, les différentes radiations électromagnétiques sont plus ou moins absorbées par les molécules présentes dans l'atmosphère, en fonction du spectre d'absorption de celles-ci. Les longueurs d'ondes du domaine de l'infrarouge, situées entre 700 nm et 500 μ m, n'échappent pas à cette règle et nous avons reporté sur la figure 1.1 le taux de transmission des ondes infrarouges en fonction de leurs longueurs d'ondes [Gaussorgues, 1999]. Nous pouvons

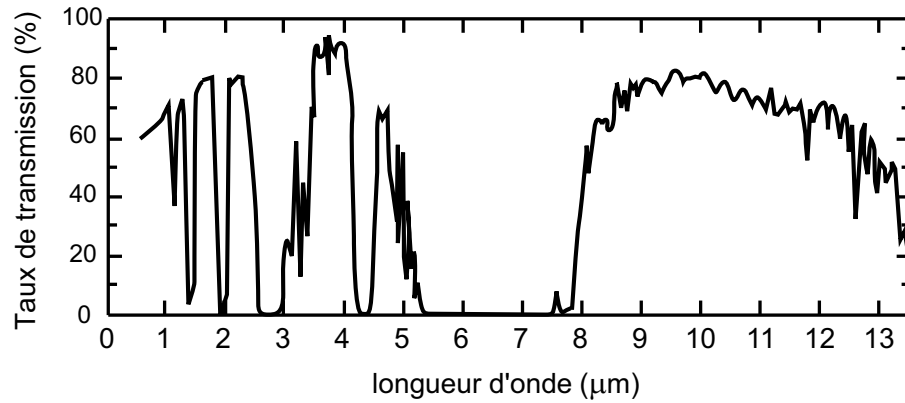


Figure 1.1 : Transmission en fonction de la longueur d'onde par temps clair.

remarquer qu'il existe des fenêtres atmosphériques de transmission, c'est à dire des plages de longueurs d'ondes pour lesquelles les radiations ne sont que faiblement absorbées par l'atmosphère terrestre. Ces fenêtres de transmission sont classées selon les longueurs d'ondes concernées de la façon suivante :

- la fenêtre NIR (Near InfraRed) correspond aux longueurs d'ondes comprises entre $0.7 \mu\text{m}$ et $1.5 \mu\text{m}$;
- la fenêtre SWIR (Short Wave InfraRed) correspond à l'intervalle de longueurs d'ondes $1.5 \mu\text{m} - 2.5 \mu\text{m}$
- la fenêtre MWIR (Medium Wave InfraRed) correspond à la plage $3 \mu\text{m} - 5 \mu\text{m}$;
- la fenêtre LWIR (Long Wave InfraRed) concerne les longueurs d'ondes comprises entre $8 \mu\text{m}$ et $14 \mu\text{m}$.

Remarquons enfin que le domaine FIR (Far InfraRed) concerne les longueurs d'ondes situées en dessus de $14 \mu\text{m}$.

D'un autre côté, les corps émettent des radiations dans différentes gammes de fréquences et en particulier des ondes du spectre infrarouge correspondant aux fenêtres atmosphériques de transmissions décrites précédemment. La densité spectrale d'énergie rayonnante $u(\lambda, T)$ diffère selon la température du corps et vérifie la loi de Planck donnée par la relation

[Stöcker *et al.*, 1999] :

$$u(\lambda, T_c) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda k_B T_c}\right) - 1} \quad (1.2)$$

où λ est la longueur d'onde d'émission, T_c la température du corps noir, \hbar la constante réduite de Planck, k_B la constante de Boltzmann et c la vitesse de la lumière dans le vide. Nous avons reporté dans la figure 1.2 l'allure de cette grandeur pour des températures de 5780 K, 300 K et 77 K, correspondant respectivement à la température du soleil, à l'ambiante, et à celle de l'azote liquide. Chaque courbe présente un maximum pour une longueur d'onde qui lui est

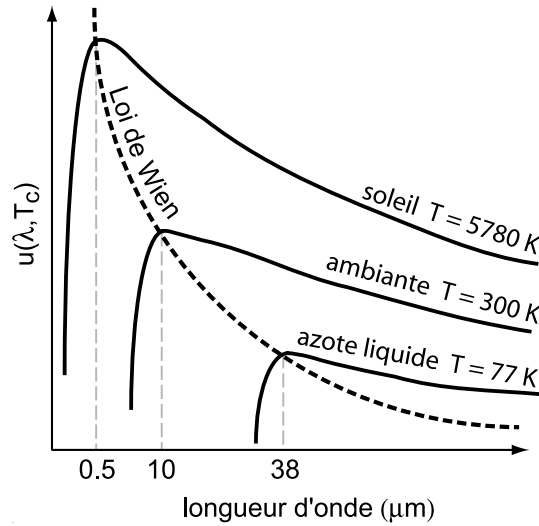


Figure 1.2 : Allure de la densité spectrale d'énergie rayonnante u en fonction de la longueur d'onde et illustration de la loi de Wien relative au déplacement du maximum d'émission.

propre. Par conséquent, pour chaque température il existe une longueur d'onde pour laquelle l'émission d'énergie par le corps noir est maximale. Ce maximum de la densité u se déplace vers des longueurs d'ondes plus grandes lorsque la température diminue en suivant la loi de Wien, énoncée par la relation :

$$\lambda_{\max} T_c = 2898 \mu\text{m.K} \quad (1.3)$$

où λ_{\max} est la longueur d'onde correspondant au maximum d'émission. Cette expression permet de conclure que le maximum d'émission d'un corps noir se trouvant à une température

environnant 300 K sera atteint pour des longueurs d’ondes se situant dans le spectre infrarouge. Par conséquent, la fabrication et la mise en place de dispositifs capables de détecter ces longueurs d’ondes présentent un très grand intérêt. Remarquons que, plus particulièrement, la longueur d’onde d’émission maximale d’un corps noir se trouvant à température ambiante se situe aux alentours de $10\text{ }\mu\text{m}$, c’est à dire dans la fenêtre LWIR, ce qui fait de cette dernière une fenêtre de prédilection pour les applications de vision nocturne ou en condition de faible visibilité.

L’intérêt drainé par la technologie infrarouge a rendu celle-ci incontournable dans un grand nombre de domaines, toujours plus nombreux, dont les principaux segments sont les applications militaires, le contrôle non-destructif et l’imagerie médicale [Destéfani, 1998]. Ainsi, des dispositifs de vision nocturne équipent les avions de chasse ou les fantassins, permettant la détection, la reconnaissance et la prise en chasse de cibles, quand des dispositifs de thermographie fournissent des informations sur la température des corps observés. D’autres systèmes permettent le guidage d’avions et de missiles ou bien la surveillance par satellite, que ce soit dans le cadre d’applications de défense ou dans le domaine civil (météorologie, détection des feux de forêts, etc.). Des applications de spectroscopie infrarouge, active ou passive, sont pour leur part mises en oeuvre dans les domaines scientifique, médical et industriel.

1.1.3.2 Principe de fonctionnement des photodétecteurs

Au XIXème siècle, période à laquelle la technologie infrarouge a fait ses premiers pas, les capteurs utilisés étaient des photopiles ou des bolomètres, dont les principes de fonctionnement étaient basés sur des effets thermoélectriques [Rogalski, 2003]. Il fallut attendre la mise en évidence de l’effet photoélectrique et surtout son explication par Albert Einstein en 1905 pour que les capteurs thermiques puissent céder la place aux *photodétecteurs quantiques* tels que nous les concevons encore aujourd’hui. C’est plus précisément en 1917 que Case développa le premier photodétecteur basé sur la conversion directe de la lumière en signal électrique [Case, 1917]. Plus tard, en 1933, la photoconductivité du PbS serait découverte faisant de ce matériau le premier semiconducteur à application optronique.

Si depuis la seconde guerre mondiale la technologie infrarouge a connu un essor extraordinaire, le principe de fonctionnement des photodétecteurs est resté le même, reposant sur l'effet photoélectrique dont le schéma de principe est reporté sur la figure 1.3. Cet effet peut

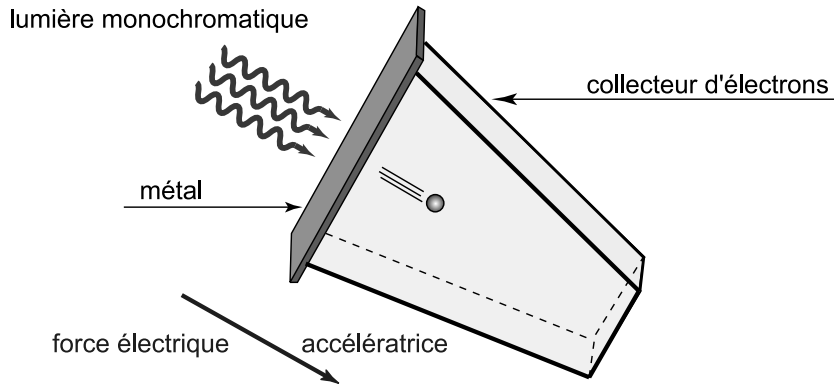


Figure 1.3 : Schéma de principe de l'effet photoélectrique.

s'énoncer ainsi : *“Lorsqu'un photon rencontre un électron prisonnier d'un atome, il lui transmet son énergie. Si l'énergie est suffisante, celui-ci peut alors s'arracher à l'atome et devenir un électron libre”*. L'énergie nécessaire pour libérer l'électron photo-excité est appelée travail de sortie. Dans le cas des photodétecteurs à base de semiconducteurs, le travail de sortie correspond à l'énergie nécessaire pour faire transiter un électron depuis un niveau dans lequel il se trouve piégé vers la bande de conduction. C'est à ce processus de transformation de la lumière en électricité par basculement d'états qu'ils doivent leur nom de détecteurs quantiques.

Le niveau piège peut être un état de la bande de valence, comme le montre la figure 1.4(a). Le travail de sortie correspond dans ce cas au gap du matériau et l'on parle d'un mode de photodétection intrinsèque. Mais ce peut être aussi un atome donneur [figure 1.4(b)] ou accepteur [figure 1.4(c)] qui engendre le niveau piège et l'on parle dans ce cas d'un mode de photodétection extrinsèque, respectivement de type n ou de type p . Cette fois-ci, le travail de sortie ne correspond plus au gap mais à l'énergie $\epsilon_c - \epsilon_d$ dans la photodétection de type n ou $\epsilon_a - \epsilon_v$ dans celle de type p , où les grandeurs ϵ_a , ϵ_d , ϵ_c et ϵ_v représentent respectivement les énergies du niveau donneur, du niveau accepteur, du minimum de la bande de conduction et du maximum de la bande de valence.

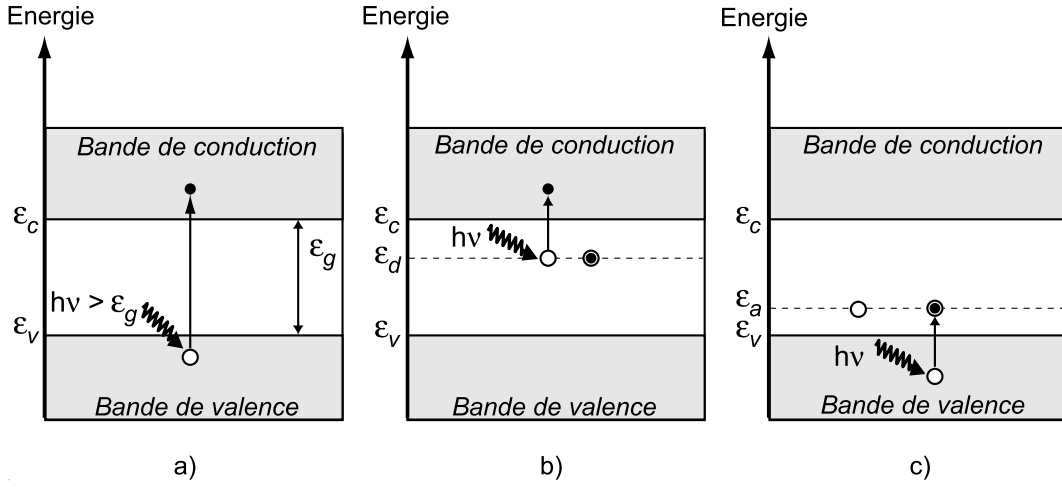


Figure 1.4 : Les types différents de photodétection : intrinsèque (a), extrinsèque de type n (b) et extrinsèque de type p (c).

1.1.4 La génération électronique indésirable et le courant d'obscurité

Si la luminosité d'une radiation détectée par le matériau semiconducteur vient à augmenter, cela correspondra à un accroissement du nombre de photons incidents et, de fait, à une élévation du nombre de porteurs générés. Ainsi, en plus de mettre en évidence la présence de lumière, les photodétecteurs sont sensibles aux variations de luminosité qu'ils traduisent par des variations de courant. De façon réciproque, une variation du courant délivré par le photodétecteur est interprétée par l'électronique qui l'accompagne comme une variation de luminosité. C'est pourquoi il faut éviter l'augmentation du courant dit *d'obscurité* en limitant autant que faire se peut la mise en place au sein du matériau de processus entraînant la création de porteurs libres par un autre biais que la photogénération. C'est dans ce but que les effets thermiques sont combattus par le refroidissement des dispositifs photodétecteurs. Remarquons d'ailleurs que le mode de photodétection des semiconducteurs extrinsèques favorise les effets de la génération thermique, et par conséquent l'augmentation du courant d'obscurité. En effet, le coefficient d'absorption d'un tel matériau étant directement fonction du dopage, celle-ci doit être aussi grande que possible pour augmenter le rendement du détecteur. Ainsi, à fréquences de cut-off égales, les semiconducteurs extrinsèques nécessitent des températures de fonctionnement plus basses que leurs homologues intrinsèques.

Notons que, outre la génération thermique, d'autres effets tels que l'ionisation par impact peuvent être responsables de l'augmentation du courant d'obscurité et par là même perturber la mesure. C'est ce qu'il se passe dans le $\text{Hg}_{0.795}\text{Cd}_{0.205}\text{Te}$, que nous présentons ci-après et pour lequel de tels effets se mettent en place à partir de champs électriques de l'ordre de 150 à 200 V/cm [Gelmont *et al.*, 1992a]. Ces champs sont relativement faibles et peuvent dans certaines conditions être engendrés par des ondes hyperfréquences, comme nous l'avons vu précédemment. Ainsi, même si l'énergie des micro-ondes est trop faible pour leur permettre de participer aux processus de photogénération, elles peuvent perturber la mesure de la luminosité en venant se superposer au champ de polarisation régnant dans le matériau et en influençant directement la dynamique des porteurs libres.

1.2 Le tellure de mercure et de cadmium

1.2.1 La place du tellure de mercure et de cadmium dans la photodétection infrarouge

La photodétection infrarouge est, à l'image de la télémétrie et de nombre d'applications, un domaine qui a pris son essor de par ses nombreuses perspectives militaires. Cependant, si le radar était un outil déjà au point durant la seconde guerre mondiale, la photodétection infrarouge n'était pour sa part qu'une technologie naissante. Elle consistait principalement en l'utilisation d'éléments de cellules simples de sulfure de plomb (PbS), opérant dans la gamme de longueurs d'ondes $1.5 - 3 \mu\text{m}$, pour la détection et la défense anti-missiles [Kruse, 1981]. Mais, très vite, l'extension du domaine spectral vers l'infrarouge moyen $3 - 5 \mu\text{m}$ puis vers la fenêtre LWIR $8 - 14 \mu\text{m}$ répondit au besoin de mettre en place d'autres applications telles que le guidage ou l'imagerie passive qui permet, en particulier, l'observation nocturne de l'ennemi à l'aide de dispositifs ne permettant pas leur détection par celui-ci.

À la fin des années 1950, des semiconducteurs comme l'antimoniure d'indium (InSb), le sélénium de plomb (PbSe) ou le tellure de plomb (PbTe) permettaient d'opérer dans la bande $3 - 5 \mu\text{m}$ quand des matériaux tels que le germanium dopé par du mercure ($\text{Ge} : \text{Hg}$)

étaient destinés à la fenêtre 8 – 14 μm . Si les deux premiers sont intrinsèques et peuvent de fait fonctionner à la température de l’azote liquide, ce dernier fonctionne sur le principe de la photodétection extrinsèque décrite précédemment et nécessite par conséquent un refroidissement nettement plus important [Rogalski, 2003]. Plus précisément, la température de fonctionnement du Ge : Hg est de 30 K, ce qui pose des problèmes en terme de coût et implique en même temps des difficultés au niveau de l’embarquement des dispositifs. L’objectif pour la bande LWIR était alors de trouver un matériau intrinsèque et pouvant opérer à 77 K : un matériau qui aurait en quelques sortes les propriétés de l’InSb mais avec un gap réduit de moitié. En 1959, Lawson *et al.* [Lawson *et al.*, 1959] mirent en évidence la dépendance de la largeur de bande interdite du HgCdTe en fonction de la fraction de cadmium. En effet, le gap de cet alliage ternaire peut être ajusté de façon continue entre 0 et 1.6 eV (à 77 K) permettant théoriquement la détection de toutes les longueurs d’ondes supérieures à 0.8 μm . Par la suite, cette propriété serait mise à profit pour mettre au point des photodétecteurs intrinsèques, à base de HgCdTe, fonctionnant dans l’ensemble des fenêtres atmosphériques, et en particulier dans l’intervalle de longueurs d’ondes 8 – 14 μm , cher aux applications de vision nocturne.

Malgré de grands obstacles technologiques, tant au niveau de la fabrication que de la caractérisation du matériau, de rapides progrès furent faits. Ainsi, dès 1965, de premiers prototypes de photodétecteurs à base de HgCdTe firent leur apparition dans des systèmes d’imagerie thermique, débouchant très vite sur la production d’éléments simples ou de petites matrices linéaires. La technologie des détecteurs photoconducteurs atteint sa maturité en 1970, en particulier dans le cas du $\text{Hg}_{0.795}\text{Cd}_{0.205}\text{Te}$, utilisé alors dans la fenêtre LWIR pour faire de la cartographie aérienne ou des systèmes FLIR (Forward Looking InfraRed) permettant la navigation et l’attaque en conditions de faible visibilité.

De nos jours, le HgCdTe est utilisé pour fabriquer des matrices photodétectrices basées sur la conversion photovoltaïque et opérant dans les différentes fenêtres atmosphériques [Destéfani, 1991]. Il ouvre des perspectives intéressantes vers des applications de photodétection multispectrales [Peyrard, 2003]. Il est utilisé tant dans le domaine militaire (guidage

de missile, défense anti-missile, vision nocturne, surveillance aérienne, etc.) que dans les domaines industriel (contrôle non-destructif) ou civil (imagerie médicale, observations satellites, etc.).

1.2.2 Propriétés physiques du tellure de mercure et de cadmium

En ce qui concerne le tellure de mercure et de cadmium, peu de paramètres électriques, tels que la mobilité ou le coefficient de diffusion, sont disponibles dans la littérature. Il est toutefois possible de trouver un grand nombre de paramètres physiques. Nous exposons ici ceux qui nous seront utiles pour mettre en place un modèle décrivant correctement ce matériau.

			IIIa	IVa	Va	VIa	VIIa
			B	C	N	O	F
			Al	Si	P	S	Cl
Ib	IIb						
Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	
Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	
Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	

Figure 1.5 : Extrait de la classification périodique des éléments.

D'un point de vue technologique, le tellure de mercure et de cadmium est un alliage ternaire fabriqué à partir de tellure de cadmium (CdTe) et de tellure de mercure (HgTe), qui sont respectivement un semiconducteur et un semimétal de type II-VI (voir figure 1.5). Ces matériaux cristallisant tous deux dans la structure blende de zinc, la structure cristallographique de l'alliage tellure de mercure et de cadmium est elle aussi de type blende de zinc. Les paramètres de maille du CdTe et du HgTe sont très proches puisqu'ils sont de 6.482 Å pour le premier et de 6.462 Å pour le second. De fait, ils sont miscibles en toutes proportions et, si l'on note x la proportion de cadmium, celle-ci peut prendre n'importe quelle valeur comprise entre 0 et 1. Le paramètre de maille a du $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ vérifie alors la relation empirique [Yoo et Kwack, 1997] :

$$a(\text{\AA}) = 6.4614 + 0.0084x + 0.0168x^2 - 0.0057x^3 \quad (1.4)$$

Cette dernière expression est reportée sur la figure 1.6. Remarquons que le paramètre de

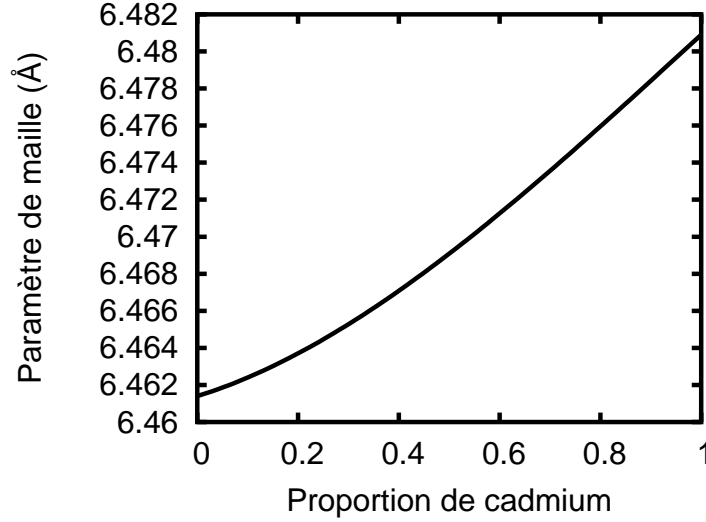


Figure 1.6 : Paramètre de maille du tellure de mercure et de cadmium en fonction de la proportion de cadmium.

maille ne varie que très peu en fonction de x .

Il existe aussi une relation empirique liant la proportion de cadmium x à la masse volumique ρ du matériau [Hansen *et al.*, 1982], exprimée par :

$$x = 3.628 - 0.44924\rho \quad (1.5)$$

où ρ est exprimée en g/cm^3 .

Si elle agit sur les paramètres cristallographiques, la proportion de cadmium modifie au même titre la structure électronique du matériau. Dans le cas de semiconducteurs cristallisant dans la structure blende de zinc, tel le HgCdTe, le modèle de la structure de bandes, reporté sur la figure 1.7, consiste en une bande de conduction ayant trois minima et en trois bandes de valence : les trous lourds, les trous légers et le split-off [Reggiani, 1985]. Les minima de la bande de conduction se trouvent alors en $\Gamma \equiv \langle 000 \rangle$, L $\equiv \langle 111 \rangle$ et X $\equiv \langle 100 \rangle$ alors que le haut de la bande de valence se trouve en Γ . Le gap ϵ_g de l'alliage tellure de mercure et

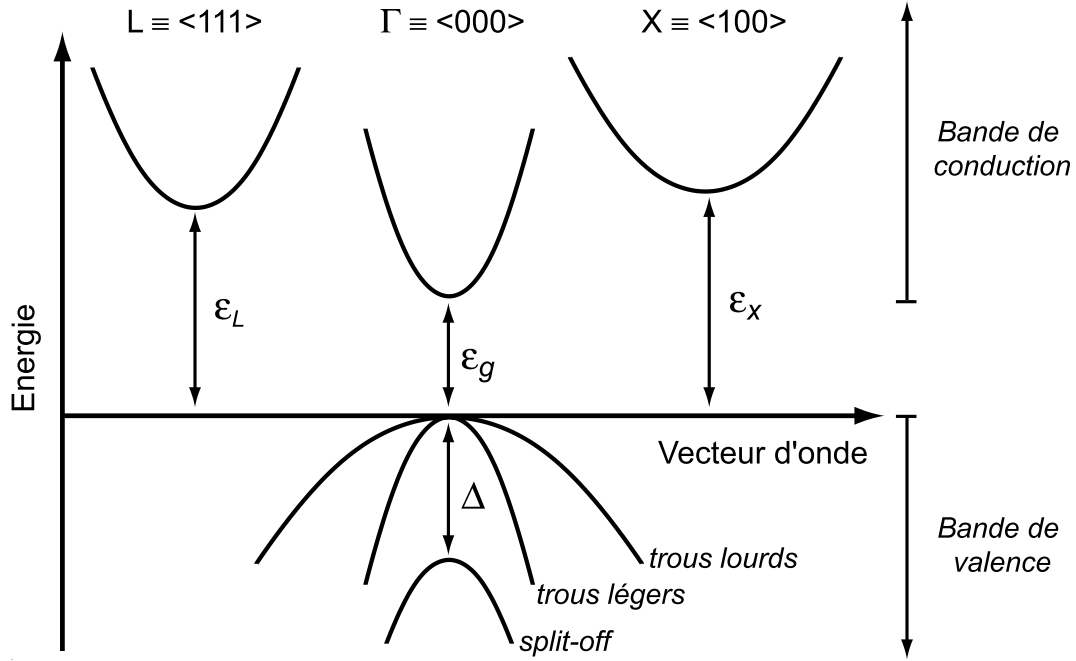


Figure 1.7 : Modèle pour la structure de bande d'un semiconducteur cristallin dans la structure blende de zinc.

de cadmium vérifie la relation empirique [Hansen *et al.*, 1982] :

$$\epsilon_g(x, T) = -0.302 + 1.93x + 5.35 \times 10^{-4}T(1 - 2x) - 0.810x^2 + 0.832x^3 \quad (1.6)$$

où T , mesurée en Kelvin, est la température du matériau et où le gap ϵ_g est donné en eV. Dans le HgCdTe qui est un semiconducteur à gap direct, ϵ_g est inférieur à ϵ_X et ϵ_L . Nous verrons plus loin que nous pouvons négliger les vallées L et X dans ce travail. L'expression (1.6) est reportée sur la figure 1.8 pour des températures de 77 et 300 K. Nous pouvons remarquer que, à 77 K, le gap du $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ est continûment ajustable entre les valeurs -0.3 et 1.6 eV, qui sont respectivement les gaps du HgTe et du CdTe. De plus, le gap n'est "positif" que pour des valeurs de x supérieures à 0.15. Dans ces conditions, ce n'est qu'à partir d'une fraction de cadmium de 15 % que l'on peut parler de matériau semiconducteur à propos du HgCdTe.

Si la proportion de cadmium x détermine le gap, il en va alors de même pour la longueur d'onde de cut-off λ_c . En effet, l'énergie d'un photon ϵ_{ph} associé à une radiation de longueur

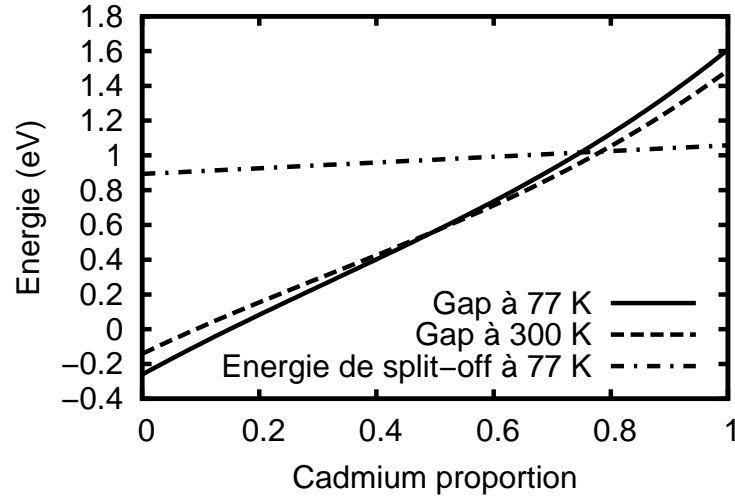


Figure 1.8 : Largeur de bande interdite ϵ_g en fonction de la proportion de cadmium pour des températures de 77 et 300 K et énergie de split-off Δ pour une température de 77 K.

d'onde λ vérifie la relation :

$$\epsilon_{ph} = \frac{hc}{\lambda} \quad (1.7)$$

Ce dernier n'est détecté que si $\epsilon_{ph} \geq \epsilon_g$ où ϵ_g vérifie la relation :

$$\epsilon_g = \frac{1.24}{\lambda_c} \quad (1.8)$$

et où λ_c est la longueur d'onde de cut-off, exprimée en μm , et ϵ_g le gap du matériau, exprimé en eV. Par conséquent, le matériau semiconducteur ne détecte que les longueurs d'ondes λ vérifiant :

$$\lambda(\mu\text{m}) \leq \lambda_c(\mu\text{m}) = \frac{1.24}{\epsilon_g(\text{eV})} \quad (1.9)$$

Nous avons reporté sur la figure 1.9 la longueur d'onde de coupure en fonction de la fraction de cadmium. Nous pouvons remarquer que la température peut influencer de manière plus ou moins importante la longueur d'onde de cut-off, suivant la proportion de cadmium constituant le matériau et que, par conséquent, il est nécessaire de la stabiliser.

Remarquons que la quasi-constance du paramètre de maille par rapport à la proportion

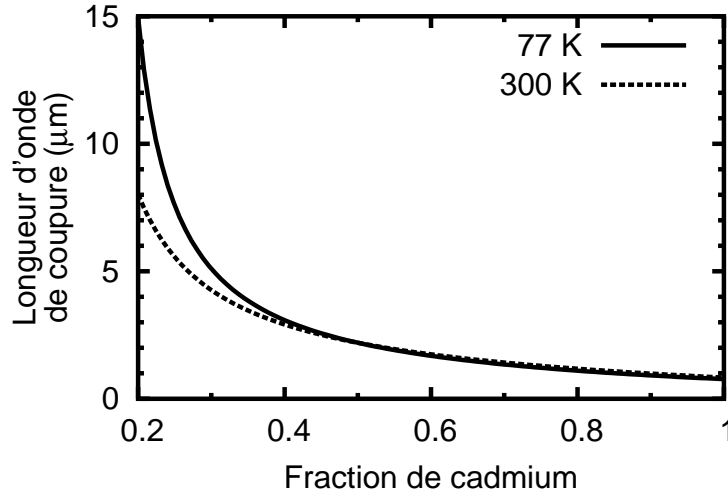


Figure 1.9 : Longueur d'onde de coupure en fonction de la fraction de cadmium pour des températures de 77 et 300 K.

de cadmium, à laquelle nous avons fait référence précédemment, est une propriété très intéressante du HgCdTe puisqu'elle permet la croissance de différentes compositions du matériau sur le même substrat. Il devient de fait possible de faire des photodétecteurs infrarouge multispectraux, c'est à dire permettant la détection à partir d'un seul et même dispositif de longueurs d'ondes appartenant à différentes fenêtres atmosphériques. Cet aspect présente à l'heure actuelle un enjeu important, notamment au niveau de l'amélioration de la détection d'objets noyés dans des environnements complexes [Peyrard, 2003].

La variation de l'énergie de split-off $\Delta(x)$ est reportée sur la figure 1.8 afin d'être comparée au gap du matériau. Celle-ci suit une évolution linéaire en x vérifiant la relation empirique [Yoo et Kwack, 1997] :

$$\Delta(x) = 0.893 + 0.165x \quad (1.10)$$

avec $\Delta(x)$ exprimée en eV. Pour des compositions de cadmium inférieures à environ $x = 0.75$, le gap du matériau est inférieur à l'énergie de split-off. La masse effective en bas de la bande de conduction m_c peut être quant à elle calculée à partir de ces grandeurs puisqu'elle vérifie

la relation [Yoo et Kwack, 1997] :

$$m_c = \frac{3\hbar^2\epsilon_g(\Delta + \epsilon_g)}{4P^2(\Delta + \frac{3}{2}\epsilon_g)} \quad (1.11)$$

où P est l'élément de matrice de Kane, avec $P \simeq 8.28 \times 10^{-10}$ eVm [Gelmont *et al.*, 1992b].

Cette dernière relation est présentée sur la figure 1.10.

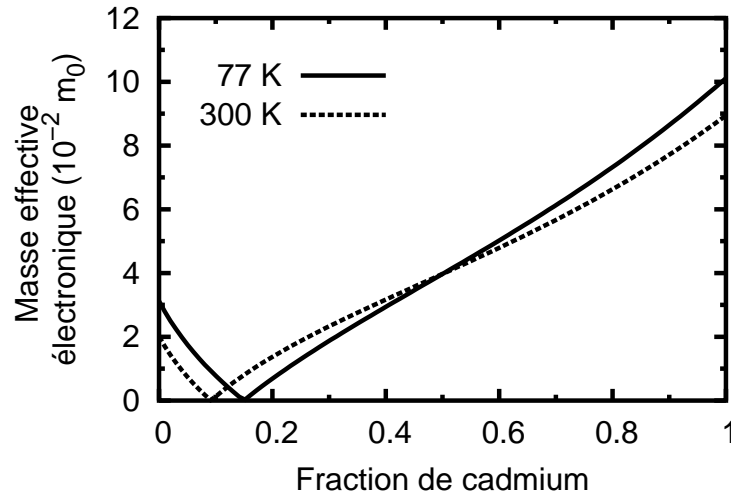


Figure 1.10 : Masse effective électronique en bas de la bande de conduction, normalisée à la masse de l'électron libre, en fonction de la fraction de cadmium pour des températures de 77 K et de 300 K.

Si l'on veut que le modèle représenté dans la figure 1.7 soit suffisamment précis et utilisable pour le plus grand nombre de semiconducteurs, il faut prendre en compte la non-parabolicité de la bande de conduction. En effet, le recouvrement des états de la bande de valence et de la bande de conduction, du à la proximité de celles-ci dans le diagramme des énergies, induit une non-parabolicité de la courbe de dispersion des états de conduction [Ridley, 1999]. Bien sûr, cette non-parabolicité dépend de la distance énergétique des deux bandes, et donc tout simplement du gap du matériau. Elle sera d'autant plus importante que ce dernier sera faible. La courbe de dispersion de la bande de conduction vérifie alors la relation [Conwell et Vassel,

1968] :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} = \epsilon(k)[1 + \alpha\epsilon(k)] \equiv \gamma(\epsilon(k)) \quad (1.12)$$

ou, de façon équivalente,

$$\epsilon(k) = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\alpha\gamma}}{2\alpha} \quad (1.13)$$

La grandeur α décrit la non-parabolicité de la bande de conduction et est de fait appelée *coefficient de non-parabolicité*. Celui-ci est relié au gap par la relation [Sang Dong Yoo et Kae Dal Kwack, 1997] :

$$\alpha = \left(1 - \frac{2m_c}{m_0}\right) \frac{1}{\epsilon_g} \left[1 - \frac{\epsilon_g \Delta}{3(\epsilon_g + \Delta)(\epsilon_g + \frac{2}{3}\Delta)}\right] \quad (1.14)$$

où m_0 est la masse de l'électron libre. Cette dernière expression est représentée sur la figure 1.11. Conformément à nos attentes, le coefficient de non-parabolicité décroît avec la

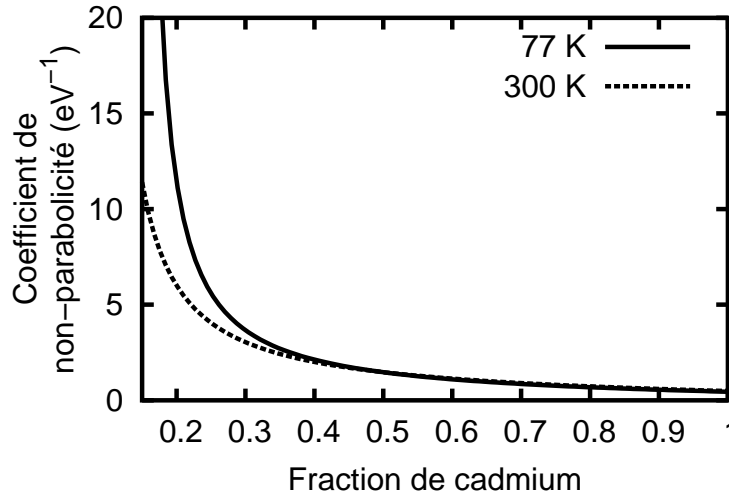


Figure 1.11 : Coefficient de non-parabolicité α en fonction de la proportion de cadmium pour des températures de 77 K et 300 K.

concentration de cadmium, c'est à dire à mesure que la largeur de bande interdite augmente. De plus, pour les faibles proportions de cadmium, celui-ci est plus important pour les températures plus basses, ce qui est dû à l'action de la température sur le gap.

La mobilité permettant d'évaluer la rapidité du matériau semiconducteur, on peut imaginer

l'importance de ce paramètre dans le cadre d'applications optroniques. Aussi, de nombreuses expérimentations ont été menées afin de mesurer la mobilité du $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ pour différentes compositions et pour différentes températures. Nous avons reporté dans la figure 1.12 les mobilités de Hall mesurées par Scott [Scott, 1971] sur différents échantillons de HgCdTe afin d'évaluer la dépendance de la mobilité en fonction de la température et de la fraction de cadmium. Pour les concentrations considérées, la figure 1.12(a) montre que la mobilité croît avec

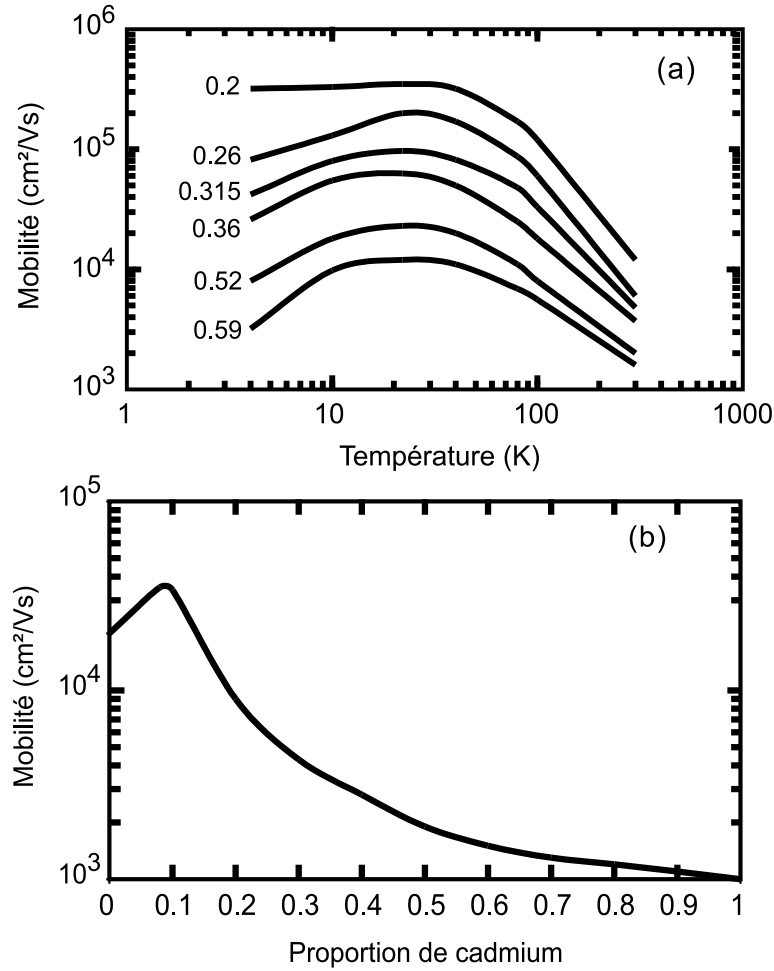


Figure 1.12 : Mobilité de Hall en fonction de la température pour différentes fractions de cadmium (a) et en fonction de la fraction de cadmium pour une température de 300 K (b). Les échantillons considérés ont des densités de porteurs inférieures à $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

la température jusqu'à 50 K. Puis elle se met à décroître lorsque cette dernière est supérieure

à 50 K. De plus, pour les faibles températures, les matériaux de HgCdTe composés de faibles proportions de cadmium présentent des mobilités élevées, puisque de l'ordre de $10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. À 300 K, la figure 1.12(b) montre que, pour des proportions de cadmium correspondant à du matériau semiconducteur (c'est à dire pour $x \geq 0.15$), la mobilité de l'alliage décroît avec la proportion de cadmium pour prendre ses valeurs entre 3×10^4 et $10^3 \text{ cm}^2/\text{Vs}$.

1.2.3 Le $\text{Hg}_{0.795}\text{Cd}_{0.205}\text{Te}$ (MCT)

Dans ce travail, nous nous intéressons plus particulièrement aux matériaux destinés à la détection des longueurs d'ondes de la fenêtre LWIR. Nous pouvons déduire de la relation (1.9) qu'il nous faut dans ce cas prendre en considération des semiconducteurs à petites largeurs de bande interdite. Plus précisément, pour des longueurs d'ondes correspondant à la fenêtre 8-14 μm , nous devons considérer des valeurs du gap comprises entre 80 et 160 meV, correspondant de fait à des proportions de cadmium avoisinant $x = 0.2$ autour de 77 K.

D'un autre côté, si l'on se place d'un point de vue technologique et que l'on s'intéresse à la croissance du tellure de mercure et de cadmium, le HgCdTe est, après recuit, un matériau naturellement dopé n [Capper, 1994].

Dans la suite de ce travail, nous considérerons le cas du $\text{Hg}_{0.795}\text{Cd}_{0.205}\text{Te}$ de type n (que nous noterons aussi MCT) ainsi qu'une température de 77 K.

1.2.3.1 Structure de bandes

Nous avons reporté sur la figure 1.13 la structure de bande du MCT. Celle-ci a été calculée [Richard, 2004] à partir des données des références [Katsuki et Kunimune, 1971] et [Graft, 1982] et à l'aide d'une méthode **k.p** 30 bandes [Yu et Cardona, 2001] développée à l'IEF Orsay [Cavassilas *et al.*, 2001].

Dans le cas du MCT, la bande de conduction centrée en Γ est fortement non-parabolique. En effet, d'après la relation (1.14), pour une proportion de cadmium $x = 0.205$ et une température de 77 K, le coefficient de non-parabolicité $\alpha \simeq 10.4 \text{ eV}^{-1}$. Remarquons de plus que, quelle que soit la composition de l'alliage semiconducteur, les surfaces d'énergies constantes

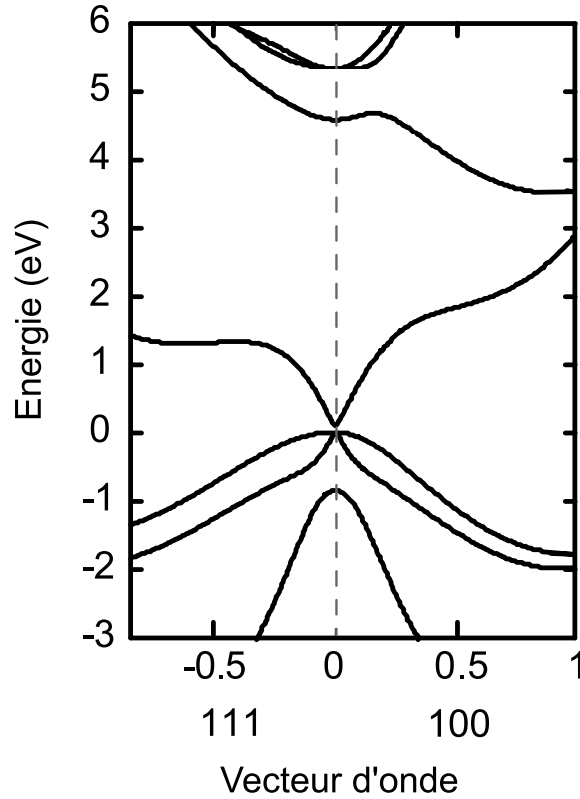


Figure 1.13 : Structure de bande du MCT.

près des minima de cette même bande sont sphériques [Kim, 1993].

Si l'on regarde la figure 1.13, on peut remarquer que le gap du MCT est très petit devant les différences d'énergies ϵ_L et ϵ_X séparant respectivement les vallées L et X de la vallée Γ . Par conséquent, au niveau du transport de charges, on peut considérer comme négligeable la probabilité qu'un électron de la vallée Γ transite dans l'un des deux groupes de vallées satellites. En effet, même si l'on applique un champ électrique suffisamment important, des phénomènes d'ionisation par impact vont intervenir avant même que l'énergie des électrons ait pu atteindre des valeurs assez élevées pour permettre la moindre transition de la vallée Γ vers les autres vallées, confinant par là-même les électrons libres en bas de la bande de conduction [Gelmont *et al.*, 1992a]. Dans le cas du MCT, le transport de charges se fait par conséquent selon ce que l'on appelle une *conduction en bas de bande*.

1.2.3.2 Masses effectives des porteurs de charges

La masse effective des électrons en bas de la bande de conduction m_c vérifie la relation (1.11) et vaut dans les conditions de température et la proportion de cadmium qui nous intéressent :

$$m_c \simeq 0.007 \quad (1.15)$$

Cette masse est extrêmement faible comparée à celle que l'on rencontre dans des semiconducteurs tels que l'AsGa (pour lequel $m_c = 0.063$) ou l'InP (pour lequel $m_c = 0.08$) [Fadel, 1988].

En ce qui concerne les trous légers, on peut supposer leur masse effective m_{lh} égale à celle des électrons [Long et Schmit, 1970]. De fait

$$m_{lh} \simeq m_c \simeq 0.007 \quad (1.16)$$

De plus, la masse des trous lourds a été mesurée expérimentalement pour différentes proportions de cadmium et différentes températures à partir d'approches expérimentales telles que des mesures d'effet Hall, de résonance cyclotron, de magnétoréflexion, etc. Celle-ci varie finalement peu avec ces deux paramètres et l'on peut encadrer la masse effective m_{hh} des trous lourds dans le tellure de mercure et de cadmium par [Miles, 1994] :

$$0.4 \leq m_{hh} \leq 0.7 \quad (1.17)$$

Remarquons enfin que la valeur de m_{hh} est très grande devant celle de m_{lh} , ce qui implique une densité d'états bien plus élevée et, par conséquent, une population bien plus importante en bande de trous lourds qu'en bande de trous légers.

1.2.3.3 Mobilités des porteurs de charges

La faible masse effective des électrons dans le MCT, dont nous avons discuté précédemment, laisse présager d'une forte mobilité électronique [Gelmont *et al.*, 1992a]. Ceci se vérifie d'ailleurs expérimentalement, ne serait-ce qu'à partir de la courbe 1.12 sur laquelle nous pouvons relever autour de 80 K une mobilité électronique d'environ $2 \times 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ pour $x \simeq 0.20$. Ces résultats sont, de plus, confortés par une série de mesures que nous avons reportées dans le tableau 1.1 et qui ont été effectuées par différents auteurs et pour des valeurs de x comprises entre 0.18 et 0.22. Enfin, Gordon *et al* [Gordon *et al.*, 1993] ont quant à eux utilisé la formule

x	T (K)	$N_D - N_A$ (cm^{-3})	μ_e (cm^2/Vs)	Référence
0.18	30	1.5×10^{15}	5×10^5	[Sivananthan <i>et al.</i> , 1988]
0.19	9	2.2×10^{14}	4.9×10^5	[Hylands <i>et al.</i> , 1986]
0.19	77	8×10^{15}	2×10^5	[de Melo <i>et al.</i> , 1989]
0.2	77	$< 10^{14}$	3×10^5	[Higgins <i>et al.</i> , 1989]
0.2	77	$< 10^{14}$	5×10^5	[Higgins <i>et al.</i> , 1989]
0.22	77	1.4×10^{16}	3×10^5	[Sangla <i>et al.</i> , 1988]

Tableau 1.1 : Valeurs de la mobilité rapportées dans la littérature pour $0.18 < x < 0.22$. N_A et N_D représentent respectivement la densité d'accepteurs et celle de donneurs.

empirique suivante valable pour de basses températures et de faibles dopages :

$$\mu_e (\text{m}^2/\text{Vs}) = 9 (m_c T)^{-3/2} \quad (1.18)$$

Dans notre cas ($x = 0.205$), la relation (1.18) donne une mobilité $\mu_e \simeq 2.3 \times 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$.

Peu d'études ont été menées sur la mobilité des trous dans le HgCdTe de type n . Toutefois, qu'il s'agisse de type p ou de type n , la mobilité des trous μ_h ne semble pas excéder $500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [Capper, 1994].

Nous devons remarquer que, pour les conditions considérées, les trous sont environ cent

fois moins mobiles que les électrons. Ceci a deux conséquences : d'une part la participation des trous au transport de charges peut être négligée au profit des seuls électrons. D'autre part, quand bien même les trous seraient pris en compte, des champs électriques relativement modérés précipitant les électrons en régime de porteurs chauds ne peuvent suffire à faire sortir le gaz de trous de l'équilibre thermodynamique [Gelmont *et al.*, 1992a].

1.2.3.4 Densité intrinsèque de porteurs

La concentration intrinsèque de porteurs n_i du tellure de mercure et de cadmium en fonction de la composition x et de la température T , pour des valeurs de x comprises entre 0.18 et 0.3, peut être approchée par la relation [Hansen *et al.*, 1982] :

$$n_i = (5.585 - 3.820x + 1.753 \times 10^{-3}T - 1.364 \times 10^{-3}xT) \times \left[10^{14} \epsilon_g^{3/4} T^{3/2} \exp\left(\frac{-\epsilon_g}{2k_B T}\right) \right] \quad (1.19)$$

où k_B est la constante de Boltzmann et n_i est exprimée en cm^{-3} . Nous avons reporté dans la figure 1.14 la densité intrinsèque n_i en fonction de la proportion de cadmium pour différentes températures (a) et en fonction de la température pour les proportions de cadmium correspondant au domaine de validité de la relation précédente (b). Nous pouvons y voir que la densité intrinsèque de porteurs libres décroît avec la proportion de cadmium et croît avec la température. Pour $x = 0.205$ et $T = 77 \text{ K}$, l'expression (1.19) donne $n_i \simeq 5.75 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$.

1.2.4 La dégénérescence dans le MCT

Les électrons étant des fermions, il n'est pas possible, en vertu du principe d'exclusion de Pauli, que deux d'entre eux se trouvent en même temps dans un même état. De fait, à l'équilibre thermodynamique, la fonction de distribution électronique suit la statistique de Fermi-Dirac donnée par [Godefroy, 1965] :

$$f[\epsilon(\mathbf{k})] = \frac{1}{\exp\left[\frac{\epsilon(\mathbf{k}) - \epsilon_f}{k_B T}\right] + 1} \quad (1.20)$$

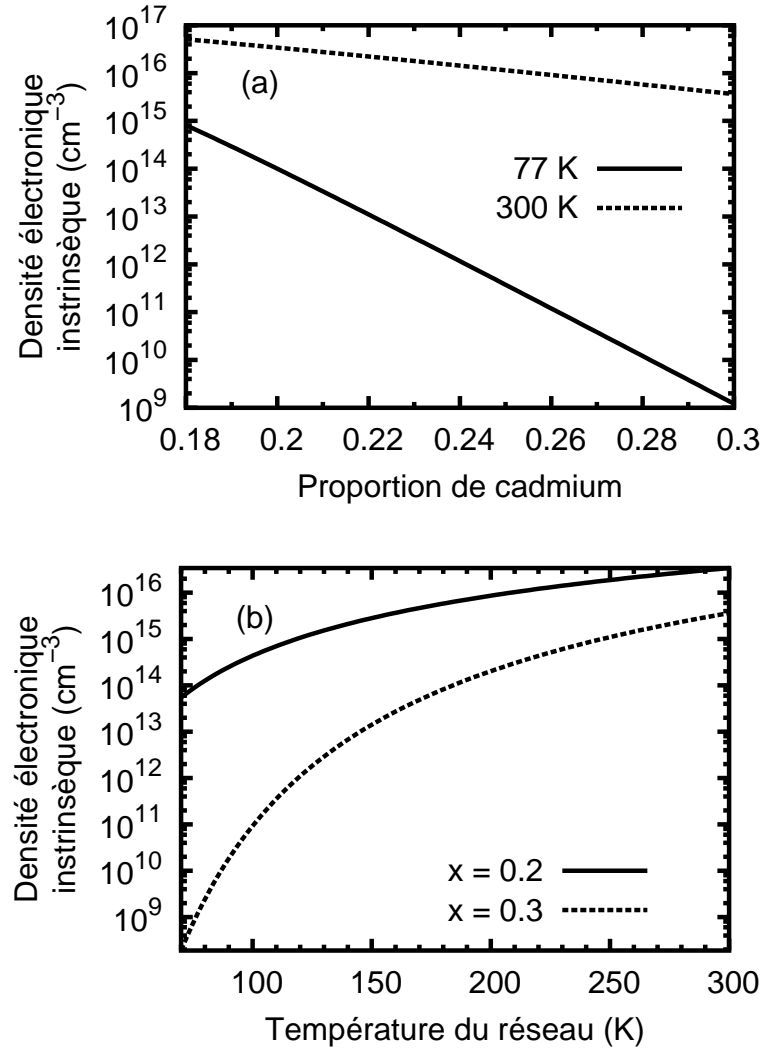


Figure 1.14 : Densité intrinsèque d'électrons en fonction de la proportion de cadmium pour différentes températures (a) et en fonction de la température pour différentes proportions de cadmium (b).

où ϵ_f est le niveau de Fermi. La fonction de distribution $f(\epsilon)$ est définie comme étant la probabilité d'occupation de l'état d'énergie ϵ . Le niveau de Fermi ϵ_f est quant à lui le niveau d'énergie électronique dont la probabilité d'occupation est égale à 1/2. Pour un système se trouvant dans son état fondamental (c'est à dire ayant une température proche de 0 K), il correspond à l'énergie en dessous de laquelle l'ensemble des états électroniques sont occupés. Pour des températures plus élevées, il continue à donner une idée précise du niveau d'énergie

en dessous duquel les états électroniques sont quasi-certainement occupés.

Lorsque le niveau de Fermi se trouve dans la bande interdite, le matériau est dit non-dégénéré et les états de la bande de conduction ont des probabilités d'occupation négligeables. Mais lorsqu'il se trouve en bande de conduction, le semiconducteur est dégénéré : la probabilité d'occupation des états se trouvant en bas de la bande n'est plus négligeable et est même, au contraire, très importante. Or, lorsque ces états sont occupés, les électrons libres doivent migrer vers des états d'énergies plus élevées, ce qui a des effets sur le transport électronique dans le matériau. En effet, comme nous le verrons dans le chapitre suivant, la nature des mécanismes influençant le transport de charges diffère selon l'énergie des électrons. De plus, le fait que les états de faibles énergies aient de fortes chances d'être occupés interdit nombre de transitions électroniques.

La dégénérescence est donc un phénomène important qu'il est nécessaire de prendre en compte lorsque besoin est. Si de fortes densités d'électrons libres sont nécessaires pour qu'elle entre en jeu dans des semiconducteurs à gaps moyens tels que le silicium ou l'AsGa, des densités relativement faibles voire proche de la densité intrinsèque suffisent dans les matériaux à petits gaps tels que le MCT. En effet, comme nous l'avons vu précédemment, la masse effective électronique est très petite dans ce matériau. La densité d'états en bas de la bande de conduction $g(\epsilon)$ s'en trouve alors réduite, celle-ci étant, dans le cas non-parabolique, liée à m_c par la relation [Kim, 1993] :

$$g(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_c}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\epsilon(1 + \alpha\epsilon)}(1 + 2\alpha\epsilon) \quad (1.21)$$

Pour avoir une idée des conditions pour lesquelles les effets dus à la dégénérescence prennent de l'importance dans le $\text{Hg}_{0.795}\text{Cd}_{0.205}\text{Te}$, évaluons l'énergie de Fermi en fonction de la densité d'électron libres. Pour ce faire, exprimons la densité d'électrons libres n en fonction de la densité d'états $g(\mathbf{k})$ et de la fonction de distribution $f(\mathbf{k})$, en intégrant sur tous les états

k. À l'équilibre thermodynamique [Ashcroft et Mermin, 1976] :

$$n = \int g(\mathbf{k})f(\mathbf{k})d\mathbf{k} \quad (1.22)$$

Puisque notre modèle prend en compte des surfaces d'énergies constantes sphériques, nous pouvons écrire [Ashcroft et Mermin, 1976] :

$$g(\mathbf{k})d\mathbf{k} = g(k)dk = 2 \times \frac{1}{2\pi^2} k^2 dk \quad (1.23)$$

où le facteur 2 rend compte du spin. De fait, la relation (1.22) est ramenée à :

$$n = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{k^2}{1 + \exp\left[\frac{\epsilon(k) - \epsilon_f}{k_B T}\right]} dk \quad (1.24)$$

À partir de cette dernière expression, nous avons calculé de façon numérique les valeurs du niveau de Fermi en fonction de la densité électronique. Les résultats sont reportés pour des températures de 77 K et de 300 K dans la figure 1.15. En considérant que les effets de la dégénérescence apparaissent de façon significative lorsque le niveau de Fermi entre en bande de conduction, nous pouvons déduire de la figure 1.15 quelles sont les densités d'électrons libres pour lesquelles il n'est plus possible de négliger raisonnablement les effets de la dégénérescence sur le transport électronique. Pour une température de 77 K, la dégénérescence doit être prise en compte dès lors que l'on considère des densités d'électrons libres supérieures à environ $n = 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Pour une température de 300 K, la dégénérescence n'intervient que pour des densités vingt fois plus importantes. Cette différence s'explique en partie par le fait que le gap est plus grand à 300 K qu'à 77 K, comme le montre la figure 1.8.

1.2.5 Les processus de recombinaison

1.2.5.1 Généralités sur la recombinaison électronique

Les processus de recombinaison sont très importants dans les matériaux utilisés en opto-électronique. En effet, les performances des dispositifs photodétecteurs dépendent de façon

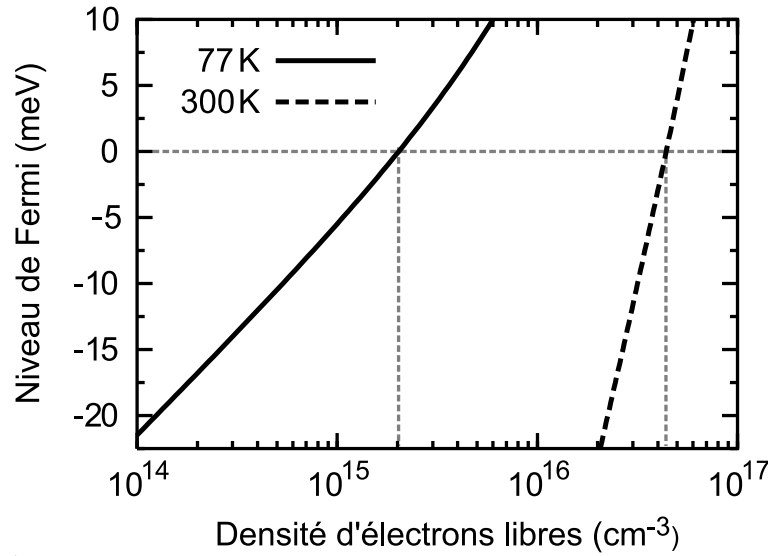


Figure 1.15 : Niveau de Fermi du MCT. L'origine des énergies est prise en bas de la bande de conduction. Les énergies positives signifient alors que le niveau de Fermi se trouve dans la bande de conduction.

critique de la durée de vie des porteurs photoexcités, qui constituent le signal [Petersen, 1981]. Comme le montre la figure 1.16, les différents mécanismes de recombinaison peuvent être classés en trois catégories :

- les recombinaisons Shockley-Read-Hall (SRH) ;
- les recombinaisons radiatives ;
- les recombinaisons Auger.

Décrivons tout d'abord ces trois modes de recombinaison.

a) La recombinaison Shockley-Read-Hall

Dans le mode de recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH), la recombinaison se produit via des niveaux d'énergie se trouvant dans le gap, qui sont dus aux défauts ou aux impuretés se trouvant dans le réseau cristallin. Ces niveaux pièges peuvent cependant, de par leur nature, être contrôlés durant le processus de croissance du matériau en rendant ce dernier aussi pur que possible. Par conséquent, le processus de recombinaison SRH n'est pas en lui-même fondamentalement limitatif de la durée de vie des porteurs libres [Petersen, 1981]. De fait,

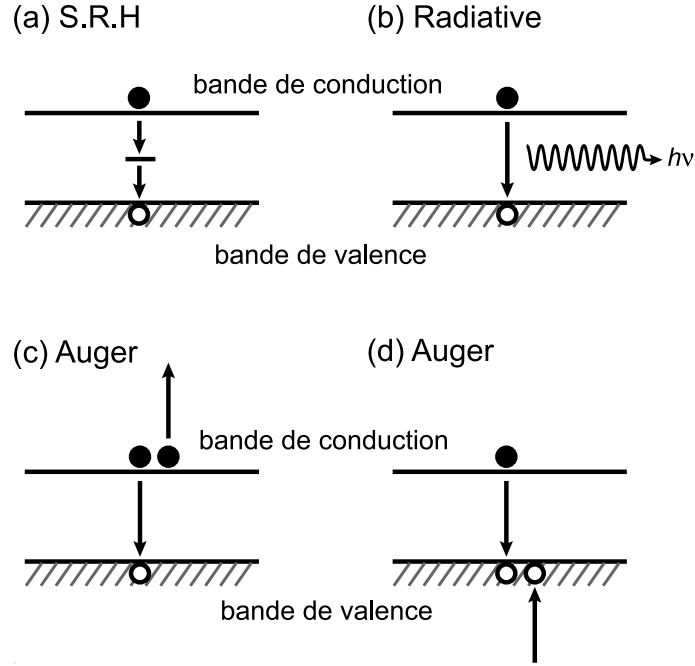


Figure 1.16 : Les processus de recombinaison : la recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH) (a), la recombinaison radiative (b) et la recombinaison Auger, mode EEH (c) et mode EHH (d). Les flèches représentent les transitions électroniques.

nous ne le prendrons pas en considération dans ce travail.

b) La recombinaison radiative

Contrairement à la recombinaison SRH, la recombinaison radiative est un processus intrinsèque dans le sens où elle ne dépend que de la structure énergétique du matériau. Par conséquent, il est impossible de supprimer ce mode de recombinaison, même en fabriquant le plus pur des matériaux semiconducteurs. La recombinaison radiative est celle que l'on trouve à la base du fonctionnement des lasers semiconducteurs. Comme le montre la figure 1.16(b), elle met en jeu un électron et un trou qui, en se recombinant, restituent la différence d'énergie électronique sous la forme d'un photon. Ce mode de recombinaison faisant intervenir deux porteurs, une bonne approximation pour le taux de recombinaison radiative est donnée par [Petersen, 1981] :

$$R_{\text{Radiative}} \propto np \sim n_i^2. \quad (1.25)$$

et puisque, d'après la relation (1.19) :

$$n_i \propto \exp\left(\frac{-\epsilon_g}{2k_B T}\right) \quad (1.26)$$

alors

$$R_{\text{Radiative}} \propto \exp\left(\frac{-\epsilon_g}{k_B T}\right) \quad (1.27)$$

c) La recombinaison Auger

La recombinaison Auger a été introduite pour la première fois en 1925 par Auger, dans le domaine de la physique atomique. En physique des semiconducteurs, elle décrit un processus de recombinaison mettant en jeu trois porteurs dont une paire électron-trou, le troisième porteur pouvant être soit un électron (voir figure 1.16(c)) dans le cas d'un processus EEH (deux électrons et un trou), soit un trou (voir figure 1.16(d)) pour un processus EHH (un électron et deux trous). Notons que les trous participant au processus peuvent appartenir aux différentes bandes de valence. De fait, il existe plusieurs types de recombinaisons Auger mais, dans tous les cas, le mécanisme s'opère par la recombinaison de la paire électron-trou qui, en disparaissant, transfère son énergie au porteur restant. C'est une recombinaison non radiative, puisqu'elle ne permet pas l'émission d'un photon. Toutefois, tout comme la recombinaison radiative, elle est intrinsèque. Enfin, puisqu'il s'agit d'un mécanisme faisant intervenir trois porteurs, une bonne approximation du taux de recombinaison Auger dans un matériau intrinsèque ou proche du régime intrinsèque peut être donnée par la relation de proportionnalité [Dmitriev et Mocker, 1995] :

$$R_{\text{Auger}} \propto n_i^3 \quad (1.28)$$

et de fait, d'après la relation (1.19) :

$$R_{\text{Auger}} \propto \exp\left(\frac{-3\epsilon_g}{2k_B T}\right) \quad (1.29)$$

1.2.5.2 Les processus de recombinaison dans le MCT

Les processus de recombinaison sont autant de phénomènes qui limitent de façon plus ou moins importante la durée de vie des porteurs et peuvent de fait hypothéquer les performances des photodétecteurs. Dans les matériaux à applications optroniques tels que le HgCdTe, les modes de recombinaison radiative et Auger sont en concurrence. Selon la structure de bande du matériau et les densités de porteurs libres mises en jeu, c'est l'un ou l'autre qui l'emporte et limite de façon prépondérante la durée de vie des porteurs libres. Plus précisément, les phénomènes de recombinaison Auger se manifestent de façon importante dans les semiconducteurs à petits gaps ou lorsque les densités de dopages sont importantes [Dmitriev et Mocker, 1995]. En effet, si l'on regarde les relations (1.27) et (1.29), on peut remarquer que, si l'ensemble des taux de recombinaison augmentent avec la diminution du gap, l'augmentation est plus grande, plus rapide, dans le cas de la recombinaison Auger. Celle-ci voit donc son efficacité croître à mesure que ϵ_g diminue et peut s'avérer dominante dans les semiconducteurs à petit gap. C'est ce qu'il se passe dans le MCT, comme l'ont vérifié Nimtz, Dornhaus, et Müller dans leurs travaux [Nimtz *et al.*, 1974].

Dans ce travail, nous négligeons les processus de recombinaison SRH et radiative au profit de la recombinaison Auger.

a) La recombinaison Auger dans le MCT

La recombinaison Auger faisant intervenir trois porteurs, elle concerne plusieurs processus différents, les trous pouvant appartenir aux différentes bandes de valence que sont la bande des trous lourds, la bande des trous légers, et le split-off. Comme le montre la figure 1.13, ce dernier se trouve environ 1 eV en dessous des maxima de la bande des trous lourds et des trous légers, qui sont pour leur part dégénérées en Γ . De fait, les processus de recombinaison faisant intervenir la bande de split-off peuvent être négligés [Orsal, 1986]. Nous avons reporté sur la figure 1.17 l'ensemble des transitions Auger possibles dans le MCT, en ne considérant que les processus ne faisant pas intervenir de phonons [Beattie, 1962]. Parmi ces dix procédés,

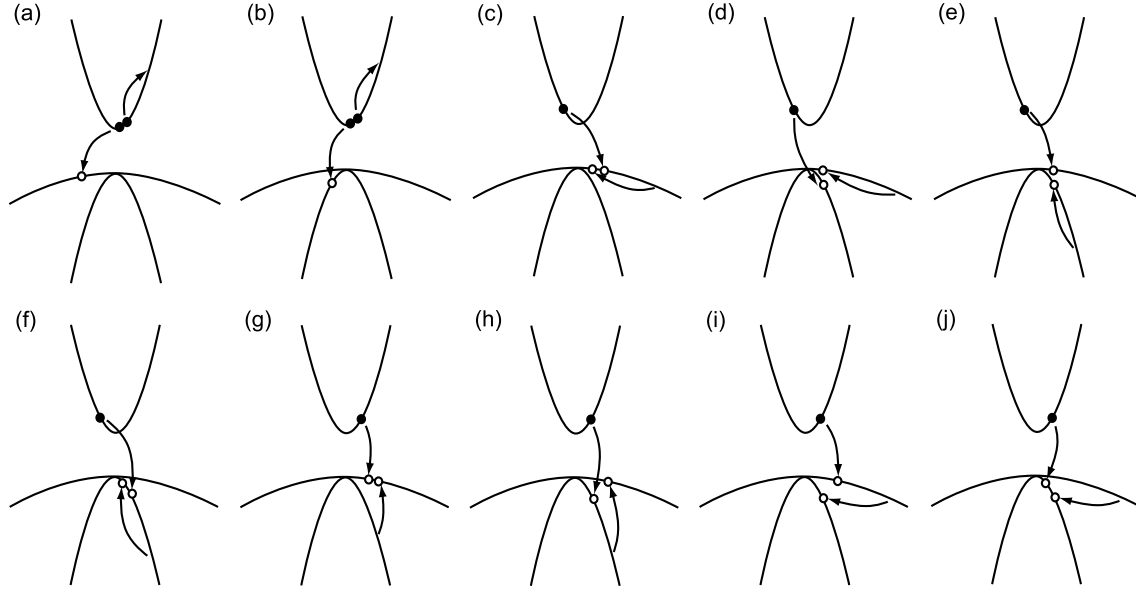


Figure 1.17 : Les dix types de recombinaisons Auger possibles dans le HgCdTe sans intervention de phonons. Les flèches représentent les transitions électroniques.

huit sont de type EHH, c'est à dire faisant intervenir deux trous et un électron. Or, dans le cas du MCT, nous considérons un matériau de type n où les électrons sont par conséquent majoritaires. Nous pouvons de fait négliger l'ensemble des processus EHH devant les processus EEH [Petersen, 1981]. Nous n'avons par conséquent à considérer que les processus CCCH (un électron de conduction donne deux électrons de conduction et un trou lourd) et CCCL (un électron de conduction donne deux électrons de conduction et un trou léger) représentés respectivement dans les figures 1.17(a) et 1.17(b).

Pour des raisons de conservation du moment et de l'énergie des porteurs intervenant dans la recombinaison, il existe une énergie d'activation directement fonction de la structure de bande du matériau et du type de transition considéré et en deçà de laquelle la transition est impossible. Cette énergie est donnée par [Petersen, 1981] :

$$\epsilon_R = \frac{1 + 2 \frac{m_c}{m_{hh}}}{1 + \frac{m_c}{m_{hh}}} \epsilon_g \quad (1.30)$$

pour le processus CCCH et par

$$\epsilon_R = \frac{1 + 2 \frac{m_c}{m_{lh}}}{1 + \frac{m_c}{m_{lh}}} \epsilon_g \quad (1.31)$$

pour le processus CCCL. Or, nous avons vu précédemment que la masse effective des trous légers m_{lh} vaut environ m_c et qu'elle est très inférieure à la masse effective des trous lourds m_{hh} . De ce fait, le seuil énergétique vaut environ ϵ_g dans le cas du processus CCCH quand $\epsilon_R \simeq \frac{3}{2}\epsilon_g$ dans le cas du CCCL. En d'autres termes, les électrons se trouvant près du fond de la bande de conduction ont la possibilité de se recombiner avec des trous lourds, mais pas avec des trous légers. Dès lors, la bande de trous légers ne joue pas un rôle important au niveau des processus de recombinaison Auger impliqués dans le MCT, puisque nous avons vu précédemment que, dans ce matériau, nous avons affaire à une conduction en bas de bande. C'est pourquoi nous ne considérons dans ce travail que les processus de recombinaison CCCH.

Nous avons reporté un exemple de recombinaison CCCH dans la figure 1.18. Dans ce processus, un électron de la bande de conduction (1) se recombine avec un trou lourd (1') et transfère son énergie à l'électron de conduction (2) qui bascule alors dans l'état (2'). Pour les

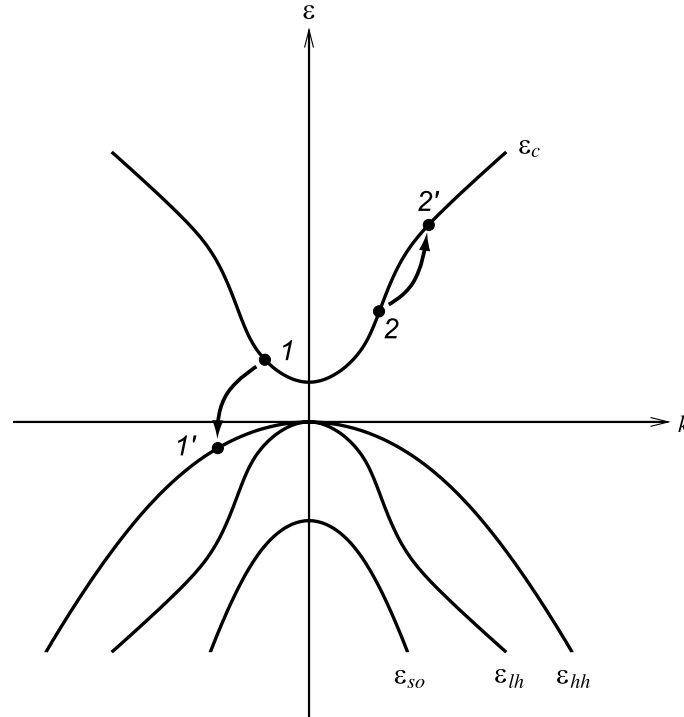


Figure 1.18 : Un processus CCCH de recombinaison Auger

valeurs de m_{hh} données par la relation (1.17), la relation (1.30) donne un seuil d'ionisation pour le processus CCCH :

$$\epsilon_R \simeq 92 \text{ meV} \quad (1.32)$$

La recombinaison Auger faisant intervenir de façon majoritaire, dans un matériau de type n , deux électrons et un trou, sa contribution à la variation de la densité électronique vérifie la relation :

$$\left. \frac{dn}{dt} \right|_{\text{Auger}} = -Rn^2p \quad (1.33)$$

où R est le coefficient de recombinaison Auger, propre au type de transition considéré, et donné en cm^6s^{-1} . Dans le cas du MCT et pour les transitions CCCH, R peut être considéré comme indépendant de la densité électronique et du champ électrique et vaut environ $R \simeq 10^{-24} \text{ cm}^6\text{s}^{-1}$ [Dmitriev et Mocker, 1995].

Nous pouvons remarquer dans l'équation 1.33 que les effets de la recombinaison sur la densité électronique dépendent de la densité de porteurs libres et sont d'autant plus importants que celle-ci est élevée. De fait, la durée de vie Auger, définie comme la durée moyenne nécessaire à un porteur pour se recombiner par le biais du processus Auger, peut varier dans un même matériau en fonction des conditions de température et du champ électrique appliqué.

D'une manière générale, la recombinaison Auger est un processus très lent par rapport aux mécanismes de collisions électroniques. Dans le MCT, la durée de vie Auger se situe autour de la microseconde [Dmitriev et Mocker, 1995; Petersen, 1981; Nimtz *et al.*, 1974].

1.2.6 La génération électronique dans le MCT

Nous avons reporté sur la figure 1.19 la densité de courant normalisée $\frac{J}{qn_0}$ en fonction du champ électrique. Cette caractéristique au premier ordre a été obtenue expérimentalement, à 77 K, sur du $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ pour lequel la fraction de cadmium $x = 0.2 \pm 0.05$ et la densité électronique à champ nul est égale à $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ [Dornhaus *et al.*, 1976]. La densité

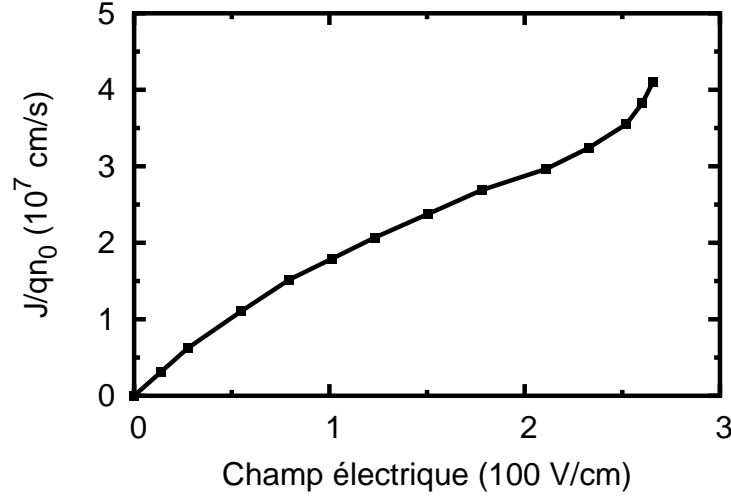


Figure 1.19 : Courbe expérimentale de la densité de courant normalisée en fonction du champ électrique, pour du $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ avec $x = 0.2 \pm 0.05$ et $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

de courant peut être ramenée à :

$$\frac{J}{qn_0} = \frac{qn\bar{v}}{qn_0} = u_i\bar{v} \quad (1.34)$$

et est de fait égale à la fraction ionisée u_i , avec

$$u_i = \frac{n}{n_0} \quad (1.35)$$

multipliée par la vitesse de dérive \bar{v} . On peut remarquer sur la figure 1.19 deux phénomènes importants. D'une part, la densité de courant normalisée n'évolue de façon linéaire avec le champ électrique que jusqu'à des champs électriques l'ordre de 50 V/cm. Au delà de ces valeurs relativement faibles, la courbe suit une évolution sublinéaire du fait de la saturation de la vitesse de dérive \bar{v} , typique du régime de porteurs chauds. Ainsi, dans le MCT, le régime de porteurs chauds est atteint pour des champs électriques inférieurs à 50 V/cm. D'autre part, on peut remarquer une augmentation soudaine de la densité de courant à partir d'à peu près 200 V/cm. Cette fois-ci, c'est la fraction ionisée u_i qui varie et dénonce la mise en place de processus de génération électrique. En effet, la forte mobilité électronique du MCT associée à

la mise en place du régime d'électrons chauds pour des champs électriques faibles permet aux électrons de la bande de conduction d'atteindre une énergie supérieure à celle du gap pour des champs électriques modérés. Ceux-ci peuvent alors transférer leur énergie aux électrons piégés dans la bande de valence qui transitent en bande de conduction, comme à la suite d'un choc arrachant les électrons aux atomes du réseau cristallin et menant au breakdown inter-bandes. Ce processus de génération électronique porte le nom d'ionisation par impact.

Remarquons que, puisque les trous ont une mobilité largement inférieure à celle des électrons, le gaz de trous reste froid pour les champs électriques suffisant à chauffer les électrons. De fait, les processus d'ionisation initiés par les trous peuvent être négligés au profit de ceux initiés par les électrons [Gelmont *et al.*, 1992a]. Par conséquent, nous ne prenons en compte dans ce travail que les processus d'ionisation par impact initiés par les électrons.

Nous avons reporté sur la figure 1.20 un exemple de processus d'ionisation par impact initié par un électron. Ce processus est de type EEH parce qu'il fait intervenir deux électrons et un trou. En effet, une fois que l'électron ionisant (1) a transmis son énergie à l'électron de valence (2), ce dernier transite dans l'état (2') laissant dans l'état (2) une place vacante : un trou. Par la suite les électrons se trouvant dans les états (1') et (2') ainsi que le trou se trouvant en (2) prennent part à la conduction électrique.

De par la nature du phénomène d'ionisation, il existe une énergie de seuil en deçà de laquelle les électrons ne sont pas en mesure d'ioniser. Cette énergie est légèrement supérieure au gap du matériau car elle doit rendre compte de la conservation de l'énergie et du moment pour les porteurs intervenant dans le processus. Dans le MCT, elle est donnée pour les électrons par [Gelmont *et al.*, 1992a] :

$$\epsilon_{\text{th}} = \left(1 + 2\frac{m_c}{m_h}\right) \epsilon_g \simeq 93 \text{ meV} \quad (1.36)$$

L'ionisation par impact crée dans le MCT une paire électron-trou et un électron à partir d'un porteur de haute énergie. Notons que, puisque le porteur ionisant doit être de haute énergie, le processus d'ionisation par impact a très peu de chance de s'amorcer à l'équilibre

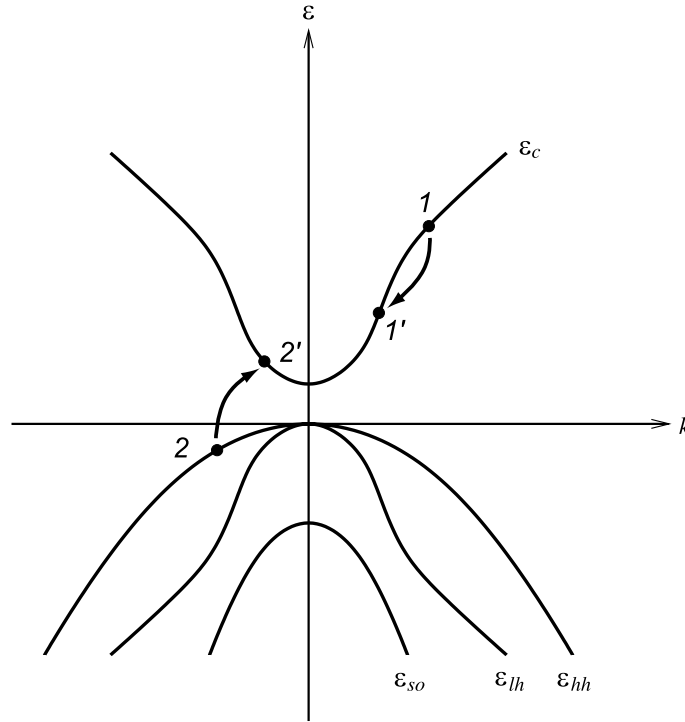


Figure 1.20 : Exemple de processus d'ionisation par impact EEH.

thermodynamique.

Si nous regardons encore la figure 1.20, nous pouvons remarquer qu'elle ressemble énormément à la figure 1.18 si ce n'est que leurs flèches sont inversées. En effet, la recombinaison Auger dont un exemple est donné sur la figure 1.18 permet la création d'un porteur de haute énergie à partir de trois porteurs dont une paire électron-trou. Par conséquent l'ionisation par impact est le processus réciproque de la recombinaison Auger, au même titre que l'absorption optique est celui de la recombinaison radiative.

La contribution de l'ionisation par impact à la variation de la densité électronique est donnée par [Nimtz *et al.*, 1974] :

$$\frac{dn}{dt} = n g \quad (1.37)$$

où $g = g(E)$ est le taux de génération par électron et par unité de temps, aussi appelé vitesse de génération ou coefficient d'ionisation. D'un point de vue expérimental, cette grandeur peut être déterminée. En effet, en renversant l'équation précédente et en supposant que la

génération a des effets négligeables sur la vitesse de dérive des porteurs, on peut écrire :

$$g(E) = \frac{1}{j(E)} \frac{dj(E)}{dt} \quad (1.38)$$

où j est la densité de courant. Remarquons que, dans la littérature, on rencontre souvent le coefficient d'ionisation $\alpha(E)$, défini comme étant la probabilité d'ionisation par électron et par unité de longueur dans la direction du champ électrique. C'est en fait l'inverse du libre parcours moyen entre deux chocs ionisants. Cette grandeur est reliée au taux de génération g et à la vitesse de dérive \bar{v} par la relation [Dmitriev et Mocker, 1995] :

$$\alpha(E) = \frac{g(E)}{|\bar{v}(E)|} \quad (1.39)$$

Les données reportées sur la figure 1.21 sont issues des travaux de Nimtz et Dornhaus [Nimtz *et al.*, 1974]. Ces travaux ont été faits sur un échantillon de $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ avec une proportion de cadmium $x = 0.205$ et une densité électronique $n = 6 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. La fi-

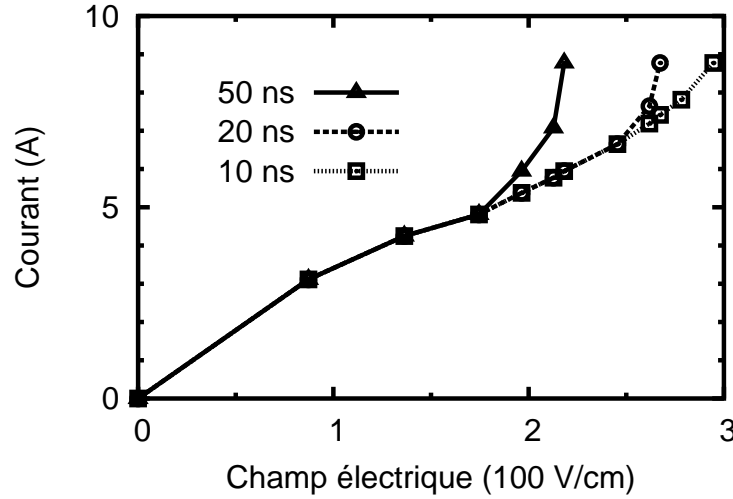


Figure 1.21 : Évolution dans le temps de la caractéristique courant-champ électrique dans du $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ pour $x = 0.205$, avec $n = 6 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

gure 1.21 décrit l'évolution temporelle de la caractéristique courant-champ électrique dans l'échantillon. Nous pouvons remarquer que, pour un champ donné supérieur à 150 V/cm,

le courant augmente en fonction du temps. Comme nous l'avons dit précédemment, cette augmentation de courant traduit une augmentation de la densité électronique, du fait de la multiplication des porteurs due à l'ionisation par impact. En dessous d'une dizaine de nanosecondes, on ne peut voir qu'un faible effet de la multiplication électronique sur le courant électrique, ce qui fait du processus de génération Auger un processus extrêmement lent au regard des autres mécanismes de collision agissant sur le transport électronique. Cette lenteur peut s'expliquer par le fait que, même à des champs électriques avoisinant les 250 V/cm, peu d'électrons ont atteint l'énergie suffisante pour être en mesure d'ioniser les atomes du réseau cristallin.

Conclusion

Après avoir situé le contexte dans lequel se place ce travail de thèse, nous avons présenté le $\text{Hg}_{0.795}\text{Cd}_{0.205}\text{Te}$ (MCT), utilisé à 77 K pour détecter les longueurs d'ondes de la fenêtre infrarouge 8 – 14 μm . En effet, l'objet de notre étude est d'évaluer les effets physiques engendrés, au sein de ce matériau, par une onde hyperfréquence de forte puissance. Les micro-ondes n'étant pas assez énergétiques pour participer aux processus de photogénération, elles agissent sur les charges libres et par conséquent sur le courant d'obscurité. Dès lors, la dynamique des porteurs de charges participant à la conduction électrique doit être modélisée correctement. À cet effet, un certain nombre de paramètres physiques essentiels à la simulation du transport de charges ont été collectés, à partir desquels nous avons décrit la structure cristallographique et énergétique du MCT et avons analysé les différents phénomènes physiques mis en jeu. Ainsi, nous avons montré que les effets de la dégénérescence ne peuvent plus être négligés à partir de densités d'électrons libres d'environ $n = 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ à 77 K. Nous avons aussi montré la présence de phénomènes de génération-recombinaison Auger et avons vu qu'ils affectaient la caractéristique au premier ordre à partir de champs électriques faibles puisque d'environ 200 V/cm. Cependant, la prise en compte des processus dominants, que sont la transition de recombinaison CCCH et l'ionisation par impact initiée par les seuls électrons, est suffisante. En effet, la faible mobilité des trous ne leur permet pas d'acquérir suffisamment d'énergie

pour des champs de l'ordre de 50 V/cm pour lesquels les électrons sont déjà en régime de porteurs chauds. De fait, leur participation peut être négligée, aussi bien en ce qui concerne le transport de charges que les processus de génération-recombinaison.

Il s'agit à présent de mettre en place un modèle capable de décrire fidèlement le transport électronique dans le MCT et rendant compte des phénomènes de génération-recombinaison, le tout à partir des paramètres dont nous disposons. Remarquons à ce propos qu'il n'y a que peu ou pas de données concernant les paramètres de transport (énergie moyenne, vitesse de dérive, etc.) du MCT ainsi que son comportement dynamique (champ hyperfréquence) qui soient disponibles dans la littérature.

Chapitre 2

Le transport électronique : théorie et modèles

Sommaire

Introduction	50
2.1 Simulation du transport électronique dans les semiconducteurs	51
2.1.1 La fonction de distribution et l'équation de Boltzmann	51
2.1.2 Les équations des moments	56
2.1.3 L'équation de Poisson	59
2.2 Méthodes de modélisation et de simulation du transport électronique	60
2.2.1 Le modèle dérive-diffusion	61
2.2.2 Le modèle hydrodynamique	64
2.2.3 La méthode de Monte Carlo	66
2.3 Les processus de collision et les différentes interactions dans le MCT à l'usage de la méthode de Monte Carlo	70
2.3.1 Les taux de transitions entre deux états	71
2.3.2 Prise en compte de la dégénérescence	74
2.3.3 Probabilités de collisions	74
2.3.4 États après collisions	82

2.4	Modélisation des processus de génération-recombinaison dans le	
	MCT	84
	Conclusion	86

Introduction

La place grandissante de l'électronique dans le monde actuel passe par une réduction de la taille des composants semiconducteurs dans le but d'atteindre une échelle d'intégration toujours plus grande. Cet effort de diminution se heurte cependant à de nombreux phénomènes physiques, liés à la taille des zones actives et à l'interaction des dispositifs avec leur environnement, qu'il est nécessaire de décrire si l'on veut pouvoir passer outre. D'un autre côté, ces mêmes phénomènes, s'ils sont pleinement compris, peuvent ouvrir de nombreux horizons en permettant de nouvelles applications. En ce sens, la micro-électronique et ses progrès dépendent de la capacité des concepteurs à appréhender les différents aspects du transport de charges. La simulation est à ce niveau très utile puisqu'elle permet un feedback intéressant entre la théorie et la technologie. En effet, en permettant la description de situations physiques qu'il serait difficile ou même impossible d'atteindre par l'expérimentation, elle a déjà permis la conception de nouveaux composants exploitant des effets spécifiques.

La clef de la compréhension des dispositifs semiconducteurs réside donc dans le développement de modèles permettant de mettre en évidence leurs caractéristiques physiques. Dans le cas de nos travaux, les hyperfréquences influencent le comportement électronique du MCT en exacerbant des phénomènes qui ne sont pas ou peu actifs en leur absence et que nous devons mettre en évidence. À cet effet, nous décrirons dans ce chapitre le transport électronique dans les semiconducteurs avant de présenter différentes méthodes permettant de résoudre l'équation de Boltzmann. Nous mettrons ensuite en place un modèle permettant la simulation microscopique du transport de charges dans le MCT ainsi que la description des phénomènes de génération-recombinaison qui jouent un rôle important dans ce matériau, et ce à partir de faibles champs électriques.

2.1 Simulation du transport électronique dans les semiconducteurs

2.1.1 La fonction de distribution et l'équation de Boltzmann

Pour un système physique quelconque, et en particulier dans un semiconducteur dont la bande de conduction est supposée parabolique, la fonction de distribution $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ décrit la probabilité pour qu'une particule se trouve en \mathbf{r} à l'instant t tout en ayant une vitesse \mathbf{v} . Du fait de cette définition, le nombre de particules localisées dans l'élément de volume de l'espace des phases $d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{v}$ à l'instant t vérifie :

$$dN(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{v} \quad (2.1)$$

De même, la densité de particules se trouvant en \mathbf{r} au temps t est donnée par l'expression :

$$n(\mathbf{r}, t) = \int_v f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)d^3\mathbf{v} \quad (2.2)$$

Cette dernière relation peut être réécrite sous la forme :

$$\int_v \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{n(\mathbf{r}, t)}d^3\mathbf{v} = 1 \quad (2.3)$$

ce qui permet de définir le rapport

$$\frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{n(\mathbf{r}, t)} \quad (2.4)$$

comme une densité de probabilité normalisée. Si l'on considère une grandeur quelconque $A(t)$ relative aux propriétés physiques d'une particule, il est alors possible de calculer sa valeur moyenne $\overline{A}(\mathbf{r}, t)$ en \mathbf{r} au temps t à l'aide de cette densité de probabilité à travers la relation :

$$\overline{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{\int_v A(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)d^3\mathbf{v}}{\int_v f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)d^3\mathbf{v}} \quad (2.5)$$

Par conséquent, la fonction de distribution donne à elle seule une information complète des propriétés physiques macroscopiques du système considéré.

Dans le cadre d'une étude du comportement électronique des porteurs de charges, si la fonction de distribution est la clef de voûte du problème, elle n'en reste pas moins sa plus grande inconnue. Aussi fait-elle l'objet de nombreuses méthodes de calcul numérique (dérive-diffusion, hydrodynamique, Monte Carlo, résolution directe de l'équation de Boltzmann) cherchant à approcher la solution de l'équation décrivant l'évolution de la fonction de distribution et par là même le transport électronique : l'équation de Boltzmann. Puisque cette équation

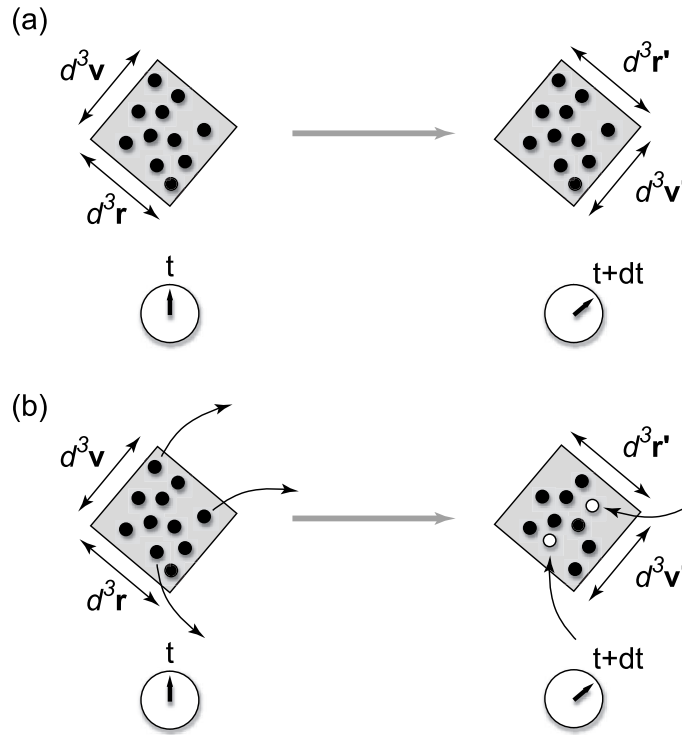


Figure 2.1 : Si l'on ne prend pas en compte les collisions (a), l'ensemble des porteurs situés dans la cellule de départ de volume $d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{v}$ à l'instant t se retrouvent à l'instant $t+dt$ dans la cellule d'arrivée de volume $d^3\mathbf{r}'d^3\mathbf{v}'$. Ce n'est plus le cas lorsque l'on prend en compte les collisions (b) puisque celles-ci peuvent, pendant l'intervalle de temps dt , dérouter des porteurs de la cellule de départ (noirs) et amener des porteurs "étrangers" (blancs) dans la cellule d'arrivée.

régit le transport électronique, nous allons l'explicitier. Pour ce faire, nous considérons un gaz

de porteurs de charges soumis à un champ électrique \mathbf{E} . Ces porteurs se mouvant dans un réseau cristallin, ils interagissent avec celui-ci et subissent par conséquent, en plus de la force électrique, diverses collisions : la variation dans le temps de la fonction de distribution est due à la fois à l'action du champ électrique \mathbf{E} sur les porteurs et aux effets des collisions.

Pour comprendre ce qu'il se passe, aidons-nous de la figure 2.1 schématisant l'espace des phases. En l'absence de collisions [figure 2.1(a)], l'ensemble des porteurs contenus dans la cellule de volume $d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{v}$ à l'instant t se retrouvent dans la cellule de volume $d^3\mathbf{r}'d^3\mathbf{v}'$ à l'instant $t + dt$. Les vecteurs \mathbf{r} et \mathbf{r}' ainsi que \mathbf{v} et \mathbf{v}' sont liés par les relations :

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + d\mathbf{r} = \mathbf{r} + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} dt \quad (2.6)$$

et

$$\mathbf{v}' = \mathbf{v} + d\mathbf{v} = \mathbf{v} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} dt \quad (2.7)$$

L'assertion précédente se traduit par :

$$f\left(\mathbf{r} + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} dt, \mathbf{v} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} dt, t + dt\right) d^3\mathbf{r}' d^3\mathbf{v}' - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{v} = 0 \quad (2.8)$$

En développant cette expression au premier ordre, il vient que :

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{v}} = 0 \quad (2.9)$$

Or

$$\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = \mathbf{v} \quad (2.10)$$

et

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \mathbf{a} = \frac{q\mathbf{E}}{m^*} \quad (2.11)$$

où \mathbf{a} est le vecteur accélération, q la charge, \mathbf{E} le champ électrique appliqué, et m^* la masse effective des porteurs. En remplaçant ces grandeurs dans l'équation (2.9), on obtient l'équation

de Boltzmann pour le cas sans collisions, donnée par :

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{r}} + \frac{q\mathbf{E}}{m^*} \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{v}} = 0 \quad (2.12)$$

Prenons maintenant en compte des collisions [figure 2.1(b)]. Dans ce cas, il peut arriver que des particules initialement contenues dans la cellule de volume $d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{v}$ n'arrivent pas à bon port ou que des particules ne se trouvant pas dans cette cellule à l'instant t soient présentes à l'instant $t + dt$ dans la cellule de volume $d^3\mathbf{r}'d^3\mathbf{v}'$. Les nombres de particules au départ et à l'arrivée peuvent alors différer, et il convient de réécrire l'équation (2.12) correctement. On obtient alors :

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{r}} + \frac{q\mathbf{E}}{m^*} \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{v}} = \left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} \right|_{\text{coll}} \quad (2.13)$$

où $\left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} \right|_{\text{coll}}$ est la contribution des processus de collisions à la variation de la fonction de distribution. Ce terme rend compte du nombre de porteurs sortant de la cellule $d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{v}$ sans rejoindre la cellule $d^3\mathbf{r}'d^3\mathbf{v}'$ et du nombre arrivant $d^3\mathbf{r}'d^3\mathbf{v}'$ sans provenir de $d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{v}$. Si l'on note $W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$ la probabilité de transition de l'état initial $|\mathbf{r}, \mathbf{v}\rangle$ à l'état final $|\mathbf{r}, \mathbf{v}'\rangle$, on exprime le terme de collisions sous la forme :

$$\left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} \right|_{\text{coll}} = \frac{V}{8\pi^3} \int_{\mathbf{v}'} \{ W(\mathbf{v}', \mathbf{v}) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) [1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)] - W(\mathbf{v}, \mathbf{v}') f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) [1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t)] \} d^3\mathbf{v}' \quad (2.14)$$

où V est le volume du cristal semiconducteur. Si $W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')$ représente la probabilité de transition de l'état $|\mathbf{r}, \mathbf{v}\rangle$ vers $|\mathbf{r}, \mathbf{v}'\rangle$, le facteur $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) [1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t)]$ représente la probabilité pour qu'en même temps l'état initial $|\mathbf{r}, \mathbf{v}\rangle$ soit occupé et l'état final $|\mathbf{r}, \mathbf{v}'\rangle$ libre.

L'équation de Boltzmann pour le transport électronique est alors donnée par :

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{r}} + \frac{q\mathbf{E}}{m^*} \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{v}} = \frac{V}{8\pi^3} \int_{\mathbf{v}'} \{W(\mathbf{v}', \mathbf{v})f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t)[1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)] - W(\mathbf{v}, \mathbf{v}')f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)[1 - f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t)]\} d\mathbf{v}' \quad (2.15)$$

Du fait de sa forme intégral-différentielle, une résolution analytique de cette équation est tout simplement utopique, à part dans un nombre extrêmement restreint de cas particuliers. Une possibilité permettant de simplifier considérablement la résolution de l'équation de Boltzmann consiste alors à utiliser l'approximation du temps de relaxation. Il s'agit de supposer que le seul effet des collisions sur la distribution des porteurs est la restauration d'une situation d'équilibre local décrite par la fonction de distribution $f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$. Cette relaxation de la fonction de distribution est supposée se faire de façon exponentielle, de sorte que l'on définit un temps de relaxation τ vérifiant la relation [Hamaguchi, 2001] :

$$\left. \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} \right|_{coll} = - \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) - f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\tau} \quad (2.16)$$

Ce temps de relaxation est caractéristique des collisions se produisant dans le matériau considéré. S'il est considéré comme constant au regard du champ électrique, la fonction de distribution change selon :

$$f(t) = f^{(0)}(t) + [f(0) - f^{(0)}(0)] \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \quad (2.17)$$

L'approximation du temps de relaxation permet alors de ramener l'équation intégral-différentielle (2.15) à une équation linéaire aux dérivées partielles, exprimée par :

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \mathbf{v} \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{r}} + \frac{q\mathbf{E}}{m^*} \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{v}} = - \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) - f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\tau} \quad (2.18)$$

En dépit des simplifications effectuées jusqu'à présent, l'extraction de la fonction de distribution n'est toujours pas triviale. D'un autre côté, dans le cadre de la simulation de dispositifs électroniques, les grandeurs physiques présentant un intérêt sont principalement la densité

n , la vitesse \mathbf{v} et l'énergie ϵ des porteurs, qui ne représentent qu'une part minime des informations contenues dans la fonction de distribution. N'investiguer que ces trois paramètres en lieu et place de la fonction de distribution représente alors une solution intéressante, qui offre une simplification considérable du problème tout en permettant une description du transport électronique proche de la réalité.

2.1.2 Les équations des moments

Le passage de l'équation (2.18) à des équations en n , \mathbf{v} et ϵ se fait à travers la méthode des moments, qui consiste à multiplier l'équation de Boltzmann par la grandeur \mathbf{v}^m , où m est un entier, avant de l'intégrer sur l'espace des vitesses.

L'application de cette méthode à l'ordre 0 nous permet d'écrire :

$$\int_v \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} + \int \frac{q\mathbf{E}}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3\mathbf{v} = - \int_v \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) - f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\tau} d^3\mathbf{v} \quad (2.19)$$

En permutant les opérateurs relatifs au temps et ceux relatifs à l'espace des phases, il vient que :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_v f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) d^3\mathbf{v} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \int_v f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \mathbf{v} d^3\mathbf{v} + \frac{q\mathbf{E}}{m^*} [f]_{-\infty}^{+\infty} = \\ - \left(\int_v \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\tau} d^3\mathbf{v} - \int_v \frac{f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\tau} d^3\mathbf{v} \right) \end{aligned} \quad (2.20)$$

Puisque la vitesse électronique a toujours une valeur finie, la probabilité d'occupation de l'état $|\mathbf{r}, \mathbf{v}\rangle$ tend vers 0 lorsque $|\mathbf{v}|$ tend vers l'infini. De fait :

$$[f]_{-\infty}^{+\infty} = 0 \quad (2.21)$$

et d'après les équations (2.2) et (2.5), l'équation du moment d'ordre 0 est donnée par :

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} [n(\mathbf{r}, t) \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t)] = - \frac{n(\mathbf{r}, t) - n_0}{\tau_n} \quad (2.22)$$

où n_0 est la densité d'électrons à l'équilibre thermodynamique et τ_n le temps de relaxation de la densité électronique. S'il n'y a pas de génération électronique, alors

$$n(\mathbf{r}, t) - n_0 = 0 \quad (2.23)$$

et, en supprimant les notations relatives à \mathbf{r} et à t , on obtient l'équation de conservation de la densité de porteurs de charges, ou équation de continuité :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(n\bar{\mathbf{v}})}{\partial \mathbf{r}} = 0 \quad (2.24)$$

De façon plus générale, si l'on définit $A(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ comme un moment d'ordre quelconque, son équation est dressée à partir de la relation :

$$\begin{aligned} \int_{\mathbf{v}} A(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial t} d^3\mathbf{v} + \int_{\mathbf{v}} A(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{r}} d^3\mathbf{v} \\ + \frac{q\mathbf{E}}{m^*} \int_{\mathbf{v}} A(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\partial \mathbf{v}} d^3\mathbf{v} = - \int_{\mathbf{v}} A(\mathbf{r}, t) \frac{f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) - f^{(0)}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)}{\tau} d^3\mathbf{v} \end{aligned} \quad (2.25)$$

En procédant de la même manière que dans le cas de l'expression du moment d'ordre 0 et en remarquant que

$$[Af]_{-\infty}^{\infty} = 0 \quad (2.26)$$

on arrive à

$$\begin{aligned} \bar{A}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + n(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \bar{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t) \overline{A(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)} \\ - \frac{q\mathbf{E}}{m^*} n(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \bar{A}}{\partial \mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) = - \frac{\bar{A}(\mathbf{r}, t) - A_0}{\tau_A} n(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (2.27)$$

On introduit alors l'équation de continuité du courant (2.24) et en développant correctement

on arrive à l'équation du moment A :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \bar{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{r}} + \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left[n(\mathbf{r}, t) \overline{A(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)} - \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) \bar{A}(\mathbf{r}, t) \right] \\ - \frac{q \mathbf{E}}{m^*} \frac{\partial \bar{A}}{\partial \mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) = - \frac{\bar{A}(\mathbf{r}, t) - A_0}{\tau_A} \end{aligned} \quad (2.28)$$

Remplaçons à présent le moment générique A par le moment d'ordre 1, c'est à dire par \mathbf{v} .
Alors :

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{r}} + \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left\{ n(\mathbf{r}, t) \left[\overline{\mathbf{v}^2}(\mathbf{r}, t) - \bar{\mathbf{v}}^2(\mathbf{r}, t) \right] \right\} - \frac{q \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{m^*} = - \frac{\bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t)}{\tau_v} \quad (2.29)$$

où τ_v est le temps de relaxation de la vitesse. Si l'on supprime les notations relatives à (\mathbf{r}, t) , l'équation relative au moment d'ordre 1, appelée équation de conservation de la vitesse, s'écrit :

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{v}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{v}} \frac{\partial \bar{\mathbf{v}}}{\partial \mathbf{r}} + \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left[n \left(\overline{\mathbf{v}^2} - \bar{\mathbf{v}}^2 \right) \right] - \frac{q \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{m^*} = - \frac{\bar{\mathbf{v}}}{\tau_v} \quad (2.30)$$

Enfin, si l'on pose

$$A = \epsilon = \frac{1}{2} m^* \mathbf{v}^2 \quad (2.31)$$

la méthode des moments appliquée à l'ordre 2 nous donne :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\epsilon}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial \bar{\epsilon}(\mathbf{r}, t)}{\partial \mathbf{r}} + \frac{1}{n(\mathbf{r}, t)} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left\{ n(\mathbf{r}, t) \left[\overline{\epsilon(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)} - \bar{\epsilon}(\mathbf{r}, t) \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) \right] \right\} \\ - \frac{q \mathbf{E}(\mathbf{r}, t)}{m^*} \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial \mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) = - \frac{\bar{\epsilon}(\mathbf{r}, t) - \epsilon_0}{\tau_\epsilon} \end{aligned} \quad (2.32)$$

et l'on peut écrire :

$$\frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial \mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) = m^* \bar{\mathbf{v}} \quad (2.33)$$

L'équation du troisième moment, ou *équation de conservation de l'énergie* s'exprime alors par :

$$\frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial t} + \bar{\mathbf{v}} \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial \mathbf{r}} + \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left[n (\overline{\epsilon \mathbf{v}} - \bar{\epsilon} \bar{\mathbf{v}}) \right] - q \mathbf{E} \bar{v} = - \frac{\bar{\epsilon} - \epsilon_0}{\tau_\epsilon} \quad (2.34)$$

où τ_e est le temps de relaxation de l'énergie.

Remarquons que si l'on regarde la relation (2.28) exprimant l'équation d'un moment d'ordre quelconque A , on voit apparaître un terme de la forme $A(\mathbf{r}, t)\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$. Par conséquent, l'équation relative au moment d'ordre m contient le moment d'ordre supérieur $m + 1$. Le développement à partir des équations des moments d'un modèle de simulation étant basé sur un nombre fini de ces équations, il va de soit que des hypothèses simplificatrices doivent être émises sur le premier des moments dont l'évolution n'est pas décrite.

2.1.3 L'équation de Poisson

Dans le cas d'un dispositif réel, si l'expression locale du champ électrique dépend de la polarisation extérieure, elle est fortement influencée par la distribution spatiale des charges présentes, qu'il s'agisse des ions fixes ou des porteurs libres. En même temps, le champ électrique provoque le déplacement des porteurs libres et induit de ce fait une modification de leur distribution spatiale à chaque instant. Il existe donc un lien étroit entre l'expression locale du champ électrique et la localisation des porteurs de charges dont il faut nécessairement rendre compte lors d'une étude du transport électronique dans un dispositif. Dans ce but, on couple l'équation de Boltzmann, ou les équations des moments, avec l'équation de Poisson. Celle-ci découle des équations de Maxwell, et plus particulièrement du théorème de Gauss local énoncé par la relation :

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{\rho(\mathbf{r}, t)}{\kappa} \quad (2.35)$$

où $\rho(\mathbf{r}, t)$ est la densité locale de charges et κ la constante diélectrique du matériau considéré. En remarquant que le champ électrique \mathbf{E} dérive du potentiel électrique V selon l'expression :

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} V(\mathbf{r}, t) \quad (2.36)$$

et que la densité de charges dans un semiconducteur est donnée par

$$\rho(\mathbf{r}, t) = q [n(\mathbf{r}, t) - p(\mathbf{r}, t) + N_A(\mathbf{r}) - N_D(\mathbf{r})] \quad (2.37)$$

où n est la densité d'électrons, p celles de trous, N_A la densité d'ions accepteurs et N_D la densité d'ions donneurs, puis en allégeant les notations, on exprime l'*équation de Poisson* par la relation :

$$\frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}^2} V = \frac{q}{\kappa} (n - p + N_A - N_D) \quad (2.38)$$

2.2 Méthodes de modélisation et de simulation du transport électronique

Il existe différentes méthodes de simulation, correspondant à différentes approches possibles et impliquant chacune diverses approximations. Si toutes ont pour vocation la description du transport électronique dans un dispositif donné, soit par une résolution de l'équation de Boltzmann (2.15) soit par celle des équations des moments (2.24), (2.30) et éventuellement (2.34), elles ne sont pas pour autant équivalentes et interchangeables. En effet, elles ne font pas toutes leurs calculs à partir des mêmes paramètres d'entrée et de fait la première sélection du modèle adéquat se fait au niveau des données dont l'utilisateur dispose sur le dispositif (géométrie, mobilité, vitesse et énergie moyennes des porteurs, structure de bandes du matériau, etc.). Par la suite, le choix du modèle à utiliser se porte sur celui qui permet une description la plus fidèle à la réalité tout en demandant les temps de calcul les plus courts.

Nous présentons ici les méthodes les plus célèbres car les plus utilisées aussi bien dans le milieu universitaire qu'industriel. Il s'agit des méthodes dérive-diffusion (DD), hydrodynamique (HD) et Monte Carlo (MC). Si les deux premières permettent des calculs très rapides de structures relativement complexes à partir des paramètres de transport des matériaux (vitesse de dérive, énergie moyenne, mobilité, etc.), cette dernière permet d'extraire ces grandeurs à partir des seuls paramètres physiques microscopiques. Nous décrirons dans cette section chacune de ces trois méthodes en explicitant les hypothèses dont elles découlent et regarderons quels sont leurs intérêts et leurs inconvénients.

2.2.1 Le modèle dérive-diffusion

Le modèle dérive-diffusion est basé sur la résolution des équations des moments décrites au paragraphe 2.1.2 en ne considérant que les deux premières, c'est à dire celles décrivant la conservation du nombre d'électrons et de la vitesse et correspondant aux moments d'ordres 0 et 1. Ce modèle est de type macroscopique parce que, faisant référence aux seules valeurs moyennes des paramètres de transport, il ne s'intéresse pas à l'évolution de chaque porteur mais plutôt à celle du gaz d'électrons. Un certain nombre d'approximations doivent être faites, en premier lieu au niveau du moment d'ordre 2 puisque l'évolution de celui-ci dans l'espace et dans le temps n'est pas décrite dans ce modèle. Ce moment correspond à l'énergie des porteurs ϵ , que nous supposons constante en tout point du dispositif, et ce quel que soit le champ électrique. En ce qui concerne l'équation du moment d'ordre 1 (2.30) nous supposons le terme $\bar{\mathbf{v}}^2(\mathbf{r}, t)$ négligeable devant $\overline{\mathbf{v}}^2(\mathbf{r}, t)$. Or ce dernier terme est, par définition, proportionnel à l'énergie cinétique. De fait :

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left[n(\mathbf{r}, t) \left(\overline{\mathbf{v}}^2(\mathbf{r}, t) - \bar{\mathbf{v}}^2(\mathbf{r}, t) \right) \right] \simeq \frac{1}{m^*} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left[n(\mathbf{r}, t) k_B \overline{T_e}(\mathbf{r}, t) \right] \quad (2.39)$$

où k_B est la constante de Boltzmann, m la masse efficace, et T_e la température électronique, vérifiant la relation :

$$\epsilon = \frac{3}{2} k_B T_e \quad (2.40)$$

L'invariance supposée de l'énergie des électrons implique que le gradient de la température électronique est négligeable, et par conséquent que celle-ci est égale en tout point du dispositif à la température du réseau cristallin T . On peut alors écrire :

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left[n(\mathbf{r}, t) k_B \overline{T_e}(\mathbf{r}, t) \right] \simeq k_B T \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t) \quad (2.41)$$

Nous supposons ensuite le gradient de vitesse négligeable, ce qui implique que :

$$\bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) \simeq 0 \quad (2.42)$$

Enfin, si nous ne nous intéressons qu'aux conditions stationnaires, nous pouvons considérer comme nulle la variation dans le temps de la vitesse :

$$\frac{\partial \mathbf{v}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \simeq 0 \quad (2.43)$$

En posant $q = -e$ dans le cas des électrons et $q = e$ dans celui des trous, où e est la charge élémentaire, et en remarquant que la densité de courant est reliée à la vitesse de dérive par la relation :

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = qn(\mathbf{r}, t)\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \quad (2.44)$$

on arrive aux équations :

$$\mathbf{J}_n(\mathbf{r}, t) = e n(\mathbf{r}, t) \mu_n(\mathbf{r}, t) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + e D_n \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} n(\mathbf{r}, t) \quad (2.45)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} n(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{e} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{J}_n \quad (2.46)$$

où e est la charge élémentaire, μ_n la mobilité électronique et D_n le coefficient de diffusion électronique, dans le cas des électrons et à :

$$\mathbf{J}_p(\mathbf{r}, t) = e p(\mathbf{r}, t) \mu_p(\mathbf{r}, t) \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) - e D_p \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} p(\mathbf{r}, t) \quad (2.47)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} p(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{e} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \mathbf{J}_p \quad (2.48)$$

où μ_p est la mobilité, D_p le coefficient de diffusion et p la densité des trous, dans le cas des trous.

Remarquons que les expressions des courants d'électrons (2.45) et de trous (2.47) comportent chacune un terme de dérive (contenant la mobilité μ) et un terme de diffusion (contenant le coefficient de diffusion D). Ceci explique le nom de "*Dérive-Diffusion*" qui est donné à ce modèle. Les inconnues des équations du modèle dérive-diffusion, auxquelles s'ajoute l'équa-

tion de Poisson, sont la densité de courant \mathbf{J} , la densité d'électrons n (ou de trous p), ainsi que le potentiel électrique V . Celles-ci sont le plus souvent calculées à partir de la seule mobilité différentielle μ puisque les paramètres d'entrée du modèle sont μ et D et que le coefficient de diffusion peut être déduit de celle-ci à l'aide de la relation d'Einstein, donnée par :

$$\frac{D}{\mu} = \frac{k_B T}{e} \quad (2.49)$$

Nous devons toutefois souligner que cette dernière relation n'est valable qu'en régime ohmique et que, par conséquent, une prise en compte de la dépendance avec le champ électrique du coefficient de diffusion en plus de celle de la mobilité affine le modèle aux forts champs.

Si les simulations basées sur cette méthode relativement simple permettent l'étude de composants complexes en régimes stationnaire et cyclostationnaire avec des temps de calcul plus qu'acceptables, les simplifications inhérentes au modèle dérive-diffusion trouvent leurs limites du fait de la diminution incessante de la taille des dispositifs. En effet, dans le cas de composants courts, la distance parcourue par les porteurs avant que leur vitesse moyenne atteigne une valeur stationnaire ne peut plus être négligée devant la longueur du dispositif. Par conséquent, la simplification correspondant à la relation (2.41) n'est plus valable. De plus, l'énergie électronique ne peut plus être considérée comme constante en tout point du dispositif. En effet, des longueurs submicroniques donnent naissance à des zones de forts champs électriques dans lesquelles les porteurs de charges ont des vitesses supérieures à celles qu'ils auraient en présence des mêmes champs mais pour des conditions homogènes et stationnaires [Ruch, 1972]. Ces effets de survitesse sont dus à la relaxation de l'énergie moyenne et au fait que le temps de relaxation de celle-ci est différent de celui de la vitesse moyenne [Snowden, 1986]. Remarquons de plus que, par construction, le modèle dérive-diffusion n'est pas adapté à la simulation des phénomènes transitoires rapides.

2.2.2 Le modèle hydrodynamique

Le modèle hydrodynamique est introduit de façon à prendre en compte l'accélération des porteurs sous l'effet des forces extérieures et de fait à pouvoir simuler des structures de géométries submicroniques ainsi que les phénomènes transitoires rapides. Dans cette approche, la relaxation de l'énergie des porteurs est décrite, et c'est sur cette grandeur que sont indexés les différents paramètres. L'évolution dans le temps et dans l'espace de l'énergie ϵ , de la densité n et de la vitesse \mathbf{v} , sont décrites par la prise en compte des trois premières équations des moments données au paragraphe 2.1.2 et correspondant aux moments d'ordre 0, 1 et 2. À ce titre, le modèle hydrodynamique constitue, à l'image du modèle dérive-diffusion, une approche macroscopique.

En ce qui concerne la conservation de la densité d'électrons, l'équation de continuité n'est autre que l'expression (2.22). Si l'on prend en compte les processus de génération-recombinaison et que l'on utilise des notations allégées, alors la première équation hydrodynamique s'écrit

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial n \bar{\mathbf{v}}}{\partial \mathbf{r}} = G(\epsilon) \quad (2.50)$$

où $G(\epsilon)$ est un paramètre décrivant la variation du nombre de porteurs due aux processus de génération-recombinaison.

En régime de *faible génération*, la deuxième équation, décrivant la conservation de la vitesse moyenne des porteurs de charges, dérive de la relation (2.30). En remarquant que [Gruzinskis *et al.*, 1993] :

$$\overline{\mathbf{v}^2}(\mathbf{r}, t) - \bar{\mathbf{v}}^2(\mathbf{r}, t) = \overline{\delta \mathbf{v}^2}(\mathbf{r}, t) \quad (2.51)$$

où $\overline{\delta \mathbf{v}^2}(\mathbf{r}, t)$ est la variance des fluctuations de la vitesse, et en allégeant les notations, on arrive à l'équation de conservation de la vitesse :

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{v}}}{\partial t} + \bar{\mathbf{v}} \frac{\partial \bar{\mathbf{v}}}{\partial \mathbf{r}} + \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \left(n \overline{\delta \mathbf{v}^2} \right) - \frac{q \mathbf{E}}{m^*} = - \frac{\bar{\mathbf{v}}}{\tau_v} \quad (2.52)$$

Enfin, la troisième équation est obtenue à partir de l'équation (2.34). Pour ce faire, on

pose [Gruzinskis *et al.*, 1993] :

$$\overline{\epsilon(\mathbf{r}, t)\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)} - \bar{\epsilon}(\mathbf{r}, t)\bar{\mathbf{v}} = \overline{\delta\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)\delta\epsilon(\mathbf{r}, t)} \quad (2.53)$$

où $\overline{\delta\mathbf{v}\delta\epsilon}$ est la covariance des fluctuations de la vitesse et de l'énergie, et en simplifiant les notations, on arrive à l'équation de conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial t} + \bar{\mathbf{v}} \frac{\partial \bar{\epsilon}}{\partial \mathbf{r}} + \frac{1}{n} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} [n \overline{\delta\mathbf{v}\delta\epsilon}] - q\mathbf{E}\bar{\mathbf{v}} = -\frac{\bar{\epsilon} - \epsilon_0}{\tau_\epsilon} \quad (2.54)$$

Ce système d'équations contient trois inconnues : $n(\mathbf{r}, t)$, $\bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t)$ et $\bar{\epsilon}(\mathbf{r}, t)$. En revanche, il contient cinq paramètres m , τ_v , τ_ϵ , $\overline{\delta\mathbf{v}^2}$ et $\overline{\delta\mathbf{v}\delta\epsilon}$ qu'il nous appartient de définir correctement. Pour cela, on suppose que l'ensemble de ces paramètres ne dépend en un point donné *que* de l'énergie moyenne locale $\overline{\epsilon(\mathbf{r}, t)}$. On suppose ensuite que les relations reliant localement ces cinq paramètres à l'énergie s'expriment de la même façon localement que dans le cas d'un matériau homogène en régime stationnaire. Cette hypothèse a deux conséquences. La première est que les taux de relaxation de la vitesse τ_v et de l'énergie τ_ϵ vont pouvoir être obtenus en annulant les dérivations spatiales (matériau homogène) et temporelles (régime stationnaire) dans les équations (2.52) et (2.54). Ainsi :

$$\tau_v = \frac{\bar{v}m^*}{qE} \quad (2.55)$$

et

$$\tau_\epsilon = \frac{\bar{\epsilon} - \epsilon_0}{qE\bar{v}} \quad (2.56)$$

où \bar{v} est la vitesse de dérive, E le module du champ électrique, et ϵ_0 l'énergie moyenne à champ nul, pour des conditions stationnaires et homogènes. La seconde conséquence est que les paramètres d'entrée d'une simulation hydrodynamique peuvent être obtenus à partir des paramètres du matériau pouvant être calculés au moyen d'un simulateur microscopique.

2.2.3 La méthode de Monte Carlo

Les méthodes dérive-diffusion et hydrodynamique que nous venons de présenter permettent la simulation du transport électronique à partir des paramètres d'entrée macroscopiques. Si pour beaucoup de matériaux semiconducteurs tels que le silicium, l'AsGa ou l'InP, ces données sont facilement accessibles, il n'en va pas de même pour le HgCdTe dont le comportement électronique est extrêmement peu décrit dans la littérature. Dans ce cas, l'utilisation des méthodes dérive-diffusion et hydrodynamique nécessite une extraction préalable de ces paramètres qui, ne pouvant être faite à partir des équations des moments, doit se faire au niveau microscopique par la résolution de l'équation de Boltzmann pour le transport électronique (2.15). La difficulté de cette équation, à laquelle nous avons déjà fait allusion précédemment, impose le recours à une méthode numérique. Pour ce faire, plusieurs possibilités nous sont offertes, qui ont la méthode itérative [Budd, 1966], la méthode matricielle [Aubert *et al.*, 1984], la résolution directe de l'équation de Boltzmann [Vaissière, 1986], les automates cellulaires [Kometer *et al.*, 1992], la méthode des paquets répartis [Hlou, 1993], la méthode de Monte Carlo [Kurosawa, 1966; Jacoboni et Reggiani, 1983], etc. Cette dernière étant la plus utilisée et ayant montré son efficacité dans de nombreuses situations physiques, c'est vers elle que se porte notre choix.

2.2.3.1 Présentation de la méthode

La méthode de Monte Carlo est une méthode numérique statistique de simulation utilisée pour résoudre des problèmes mathématiques. En effet, elle permet de simuler des distributions de grandeurs aléatoires et, par là même, d'utiliser les nombres aléatoires pour extraire des solutions qui, elles, ne le sont pas forcément. Au delà de l'étude du transport électronique, elle trouve ses applications dans des domaines variés, s'avérant particulièrement efficace pour la résolution de problèmes de diffusion et collision ainsi que pour le calcul d'intégrales multiples. Mise au devant de la scène à la fin de la seconde guerre mondiale pour la simulation des réactions nucléaires et ayant pris depuis une importance croissante, la méthode Monte Carlo doit son nom à son aspect stochastique qui n'est pas sans rappeler les jeux de hasards pour lesquels la principauté de Monaco est célèbre. Dans le cas du transport électronique,

l'approche statistique de l'équation de Boltzmann est faite par une simulation directe de la dynamique des porteurs de charges dans le cristal semiconducteur sur la base d'un certain nombre de paramètres physiques du matériau considéré. Le mouvement de chaque porteur, soumis à l'action conjointe du champ électrique et de ses interactions avec le réseau cristallin, est alors simulé par une série de vols libres et de collisions. À chaque étape, la durée de vol et la transition d'état subie par le porteur sont tirés au sort en respectant des distributions de probabilités rendant compte de la physique des processus microscopiques mis en jeu.

Le principal avantage de la méthode de Monte Carlo est que, à chaque instant, la vitesse et l'énergie de chacun des porteurs de charge sont connues et qu'elle permet, de ce fait, l'extraction de n'importe quel paramètre de transport, qu'il s'agisse de la vitesse de dérive, de l'énergie, de la mobilité, du coefficient de diffusion, etc. En effet, la moyenne décrite par l'équation (2.5) (page 51) est remplacée dans ce cas par une moyenne sur l'ensemble des porteurs et dans le temps. Par conséquent, la méthode de Monte Carlo ne présente pas une approche concurrente aux méthodes macroscopiques, mais plutôt une étape complémentaire, s'avérant dans notre cas indispensable. Remarquons toutefois que les durées de transport simulées pour un temps de calcul donné sont beaucoup plus petites dans le cadre de la méthode Monte Carlo que dans les méthodes macroscopiques.

2.2.3.2 Déroulement d'une simulation Monte Carlo

L'organigramme de la figure 2.2 décrit le déroulement typique d'une simulation Monte Carlo appliquée à l'étude du transport électronique dans un semiconducteur. Nous allons en décrire les principales étapes.

Remarquons que, dans ce travail, nous considérons le cas d'un matériau homogène, et négligeons de fait les variables d'espace. Nous notons les états $|\mathbf{k}\rangle$ en lieu et place de $|\mathbf{r}, \mathbf{v}\rangle$ avec

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{k}} \quad (2.57)$$

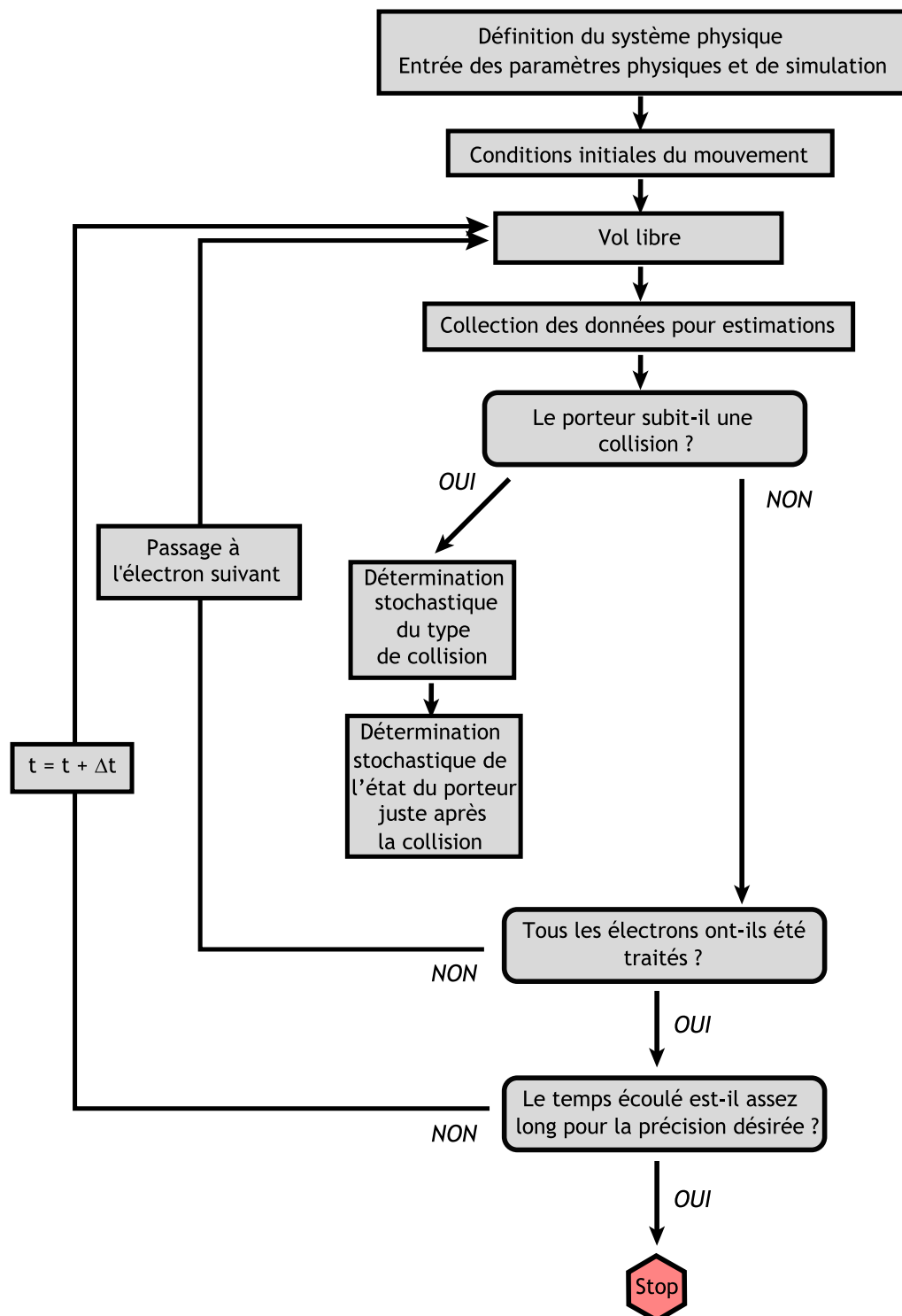


Figure 2.2 : Organigramme d'une simulation Monte Carlo pour le matériau.

a) Système physique et simulation

Le point de départ du simulateur est la définition du système physique étudié à partir des différents paramètres physiques du matériau tels que la largeur de bande interdite, la masse effective, le coefficient de non-parabolicité, etc. Dès lors, les différents taux de transition correspondant aux mécanismes de collision considérés sont calculés. D'autres paramètres tels que le nombre de porteurs à simuler, la durée totale de simulation, et le pas sur le temps sont aussi définis à ce niveau.

b) Conditions initiales du mouvement et durée simulée

Les conditions initiales du mouvement sont choisies en générant les états initiaux selon une distribution maxwellienne correspondant à la température choisie. Ensuite, la première partie de la simulation, pendant laquelle le système évolue vers l'état stationnaire, est éliminée des calculs des valeurs moyennes.

c) Série de vols libres jusqu'à la collision

Soit $P(\epsilon) \Delta t$ la probabilité totale qu'un porteur d'énergie ϵ subisse une collision pendant l'intervalle de temps Δt . Le transport de charges est alors modélisé en faisant subir à chaque électron un vol libre pendant la durée Δt , choisie suffisamment courte pour que le produit $P(\epsilon) \Delta t$ soit très inférieur à un, et correspondant au pas de la simulation. Les porteurs ne sont alors soumis qu'au seul champ électrique \mathbf{E} et leurs états $|\mathbf{k}\rangle$ varient selon la relation :

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = e\mathbf{E} \quad (2.58)$$

À la fin du vol libre, un nombre r_0 est tiré au hasard pour chaque électron et est comparé à la grandeur $P(\epsilon) \Delta t$. Si $r_0 > P(\epsilon) \Delta t$, alors le porteur subit un autre vol libre. Dans le cas contraire, il subit une collision.

d) Détermination stochastique du type de collision

Le type de collision que subit le porteur doit être déterminé. Un mécanisme doit alors être choisi parmi tous les mécanismes possibles : le nombre aléatoire r_0 est alors comparé aux sommes successives des $P_i \Delta t$, et un mécanisme est choisi. Plus précisément, le j^e mécanisme est choisi si :

$$\sum_{i=1}^{j-1} P_i \Delta t < r_0 \leq \sum_{i=1}^j P_i \Delta t \quad (2.59)$$

e) Détermination stochastique de l'état juste après la collision

Une fois que le mécanisme de collision qui a causé la fin du vol libre a été déterminé, le nouvel état électronique $|\mathbf{k}'\rangle$ est généré de façon stochastique à partir de la probabilité de transition $W_j(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ de l'état $|\mathbf{k}\rangle$ à l'état $|\mathbf{k}'\rangle$ et correspondant au mécanisme choisi.

2.3 Les processus de collision et les différentes interactions dans le MCT à l'usage de la méthode de Monte Carlo

La dynamique d'un électron se déplaçant dans un réseau cristallin est influencée par les forces extérieures telles que le champ électrique mais aussi le potentiel coulombien engendré par les ions du réseau. D'après la théorie de Bloch et l'approximation de l'électron indépendant, un électron se trouvant dans un réseau d'ions parfaitement périodique ne subit aucune collision [Ashcroft et Mermin, 1976]. Cependant, une perturbation du potentiel périodique de quelque manière que ce soit est pour l'électron une source de collisions à même de modifier sa vitesse et son énergie.

Si l'on omet les interactions électron-électron, que nous ne prenons pas en compte dans ce travail, les différents types de collisions peuvent être classés en deux grands groupes :

- Les collisions avec les impuretés et les défauts.

Les impuretés et les défauts cristallographiques tels que les joints de grains, les dopants, les lacunes, les dislocations, etc. correspondent à des altérations localisées de la périodicité du réseau cristallin. De fait, ils forment des centres de diffusion locaux loin desquels

les probabilités de transitions électroniques deviennent négligeables.

- Les collisions avec le réseau cristallin.

Même si un réseau cristallin parfaitement périodique ne comportait aucun défaut localisé tels que ceux précédemment énoncés, cela n'impliquerait pas pour autant l'absence totale de processus de collision. En effet, sous l'effet de la température, les ions occupant les noeuds du réseau s'agitent et vibrent, provoquant une déformation du réseau cristallin et par conséquent des variations quasi-instantanées du potentiel électrique en tout point du réseau. En ce sens, les collisions avec le réseau cristallin ne sont pas localisées, contrairement aux collisions avec les impuretés. Remarquons que dans les composés binaires ou ternaires tels que le HgCdTe, les différents noeuds du réseau sont occupés par des ions de charges différentes qui, en oscillant, ajoutent une composante piézoélectrique aux effets de la déformation sur le potentiel électrique.

2.3.1 Les taux de transitions entre deux états

Au vu de la structure de bande du matériau représentée sur la figure 1.13 les différences énergétiques entre la vallée Γ et les vallées L d'une part et X d'autre part sont plus de vingt fois supérieures au gap et nous négligeons à ce titre les collisions intervallées. De précédents travaux [Gelmont *et al.*, 1992b] ont montré que les seuls mécanismes de collision influençant le transport électronique de façon efficace dans le MCT sont les interactions avec les phonons optiques polaires, les transitions dues au désordre d'alliages, et les diffusions d'électrons par les impuretés ionisées.

Si la dynamique des électrons est simulée comme s'il s'agissait de particules classiques, les différents taux de collisions sont pour leur part calculés à partir de la règle d'or de Fermi [Reggiani, 1985], ce qui fait de la méthode Monte Carlo une approche semi-classique, semi-quantique. En effet, si l'on appelle H_0 l'Hamiltonien correspondant au potentiel périodique et les états $|\mathbf{k}\rangle$ d'énergie $\epsilon(\mathbf{k})$ ses états propres alors :

$$H_0 |\mathbf{k}\rangle = \epsilon(\mathbf{k}) |\mathbf{k}\rangle \quad (2.60)$$

Chaque mécanisme de collision ajoute à l'Hamiltonien H du système une composante H' telle que

$$H = H_0 + H' \quad (2.61)$$

qui est suffisamment faible au regard de H_0 pour être considérée comme une petite perturbation induisant des transitions entre les états non-perturbés propres à H_0 . Par conséquent, si l'on note $|\mathbf{k}\rangle$ l'état occupé par un électron avant de subir une collision correspondant à la perturbation H' et $|\mathbf{k}'\rangle$ celui qu'il occupe après l'avoir subie, on peut exprimer la probabilité de transition de $|\mathbf{k}\rangle$ vers $|\mathbf{k}'\rangle$ dans le cadre de la théorie des perturbations par la relation :

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k} | H' | \mathbf{k}' \rangle|^2 \delta [\epsilon(\mathbf{k}') - \epsilon(\mathbf{k}) \pm \hbar\omega_{ph}] \quad (2.62)$$

où $\pm\hbar\omega_{ph}$ représente l'énergie du phonon mis en jeu lors de la transition, suivant qu'il sera émis ou absorbé, et où δ est la fonction de Dirac. Si la transition est élastique alors $\hbar\omega_{ph} = 0$. Or, nous pouvons écrire :

$$|\langle \mathbf{k} | H' | \mathbf{k}' \rangle|^2 = |V(\mathbf{q})|^2 G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (2.63)$$

où $|V(\mathbf{q})|$ est l'élément de la matrice de transition fonction du vecteur $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ et $G(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ le facteur de recouvrement (*overlap factor* en anglais). L'équation (2.62) devient alors

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |V(\mathbf{q})|^2 G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta [\epsilon(\mathbf{k}') - \epsilon(\mathbf{k}) \pm \hbar\omega_{ph}] \quad (2.64)$$

Les valeurs de l'élément de matrice élevé au carré $|V(\mathbf{q})|^2$ pour les différents types de collisions considérés sont reportées dans le tableau 2.1.

Le facteur de recouvrement est défini comme l'intégrale sur la cellule primitive du réseau direct des parties périodiques des fonctions d'ondes de Bloch $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ et $u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r})$ correspondant respectivement aux états $|\mathbf{k}\rangle$ et $|\mathbf{k}'\rangle$ [Ridley, 1999]. Ainsi :

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \left| \int_{\text{cell}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2 \quad (2.65)$$

Dans les semiconducteurs dont la bande de conduction peut être supposée parabolique, on

Type d'interaction	$ V(\mathbf{q}) ^2$
Polaires optiques [Fawcett <i>et al.</i> , 1970]	$\frac{2\pi e^2 K_B \theta_{op}}{V_0 \kappa q^2} \left(\frac{1}{\kappa_\infty} - \frac{1}{\kappa_s} \right) \left(N_{op} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right)$
Impuretés ionisées [Hamaguchi, 2001]	$\frac{n_I Z^2 e^4}{V_0 (\kappa \kappa_0)^2 (q^2 + q_s^2)}$
Désordre d'alliage [Gelmont <i>et al.</i> , 1992b]	$\frac{x(1-x)(\Delta \epsilon_c)^2}{V_0 N_{Cd}}$

Tableau 2.1 : Expressions des différents $|V(\mathbf{q})|^2$. Les différentes variables sont explicitées dans les pages suivantes.

peut considérer la partie périodique de la fonction de Bloch comme étant sensiblement la même pour tous les états se trouvant en bas de bande. Ainsi

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \simeq u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) \quad (2.66)$$

ce qui implique que

$$G_{\text{parabolique}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = 1 \quad (2.67)$$

Dans le cas des matériaux à petits gaps tels que le MCT, l'influence de la bande de valence sur la bande de conduction mène à une forte non-parabolicité de cette-dernière et perturbe les fonctions de Bloch des électrons libres de sorte que la relation (2.66) n'est plus valable. On montre alors que [Fawcett *et al.*, 1970] :

$$G(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{\{[1 + \alpha \epsilon(\mathbf{k})]^{1/2} [1 + \alpha \epsilon(\mathbf{k}')]^{1/2} + \alpha [\epsilon(\mathbf{k}) \epsilon(\mathbf{k}')]^{1/2} \cos \theta\}^2}{[1 + 2\alpha \epsilon(\mathbf{k})][1 + 2\alpha \epsilon(\mathbf{k}')] } \quad (2.68)$$

2.3.2 Prise en compte de la dégénérescence

Au delà des termes en $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, on voit apparaître dans l'équation de Boltzmann (2.15) des termes en $[1 - f(\mathbf{k}, t)]$. Ceux-ci traduisent les effets de la dégénérescence, c'est à dire le fait que deux électrons ne peuvent pas se trouver en même temps dans le même état. Par conséquent, une transition électronique n'est possible que si l'état d'arrivée n'est pas déjà occupé. Le principe d'exclusion de Pauli est introduit dans le simulateur en utilisant l'algorithme de Lugli et Ferry, décrit dans la référence [Lugli et Ferry, 1985]. Dans ce cas, les probabilités de collisions restent inchangées que l'on prenne en compte la dégénérescence ou pas. Par contre, tout processus de collision dont l'état final est déjà occupé est remplacé par un self-scattering [Rees, 1968].

2.3.3 Probabilités de collisions

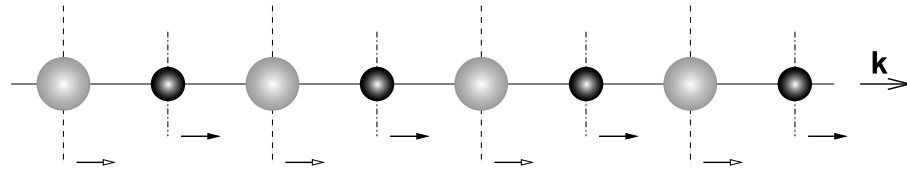
Si l'on considère un type donné de collision, sa probabilité d'occurrence $P(\epsilon)$ est définie comme la probabilité pour qu'un électron se trouvant dans l'état $|\mathbf{k}\rangle$ d'énergie $\epsilon = \epsilon(\mathbf{k})$ subisse ce type de collision avant de basculer dans un autre état. Ainsi

$$P[\epsilon(\mathbf{k})] = P(\epsilon) = \frac{V}{8\pi^3} \int_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') d\mathbf{k}' \quad (2.69)$$

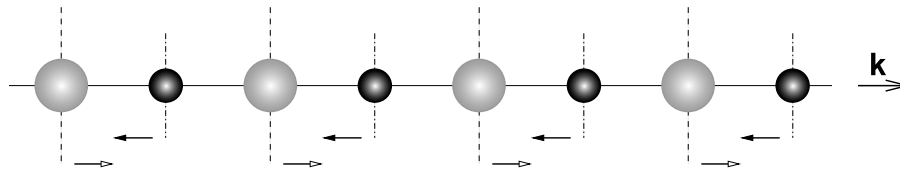
Nous pouvons à partir de cette relation exprimer les probabilités de transition dues aux différents mécanismes de collision considérés.

Les interactions optiques polaires

Les phonons optiques polaires doivent leur existence à des processus électrostatiques. En effet, comme le montrent les figures 2.3(b) et 2.4(b), les phonons optiques correspondent à un mode d'oscillation des noeuds du réseau cristallin impliquant une variation relativement importante de leurs distances relatives. Dans les matériaux dits polaires tels que l'AsGa, l'InP ou le HgCdTe, les noeuds du réseau sont occupés par des anions et des cations et, par conséquent, de telles oscillations impliquent des variations du potentiel électrostatique.

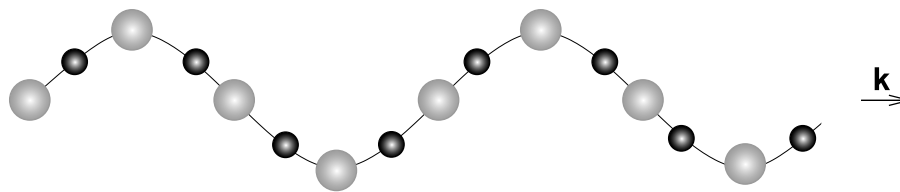


(a) Phonon acoustique

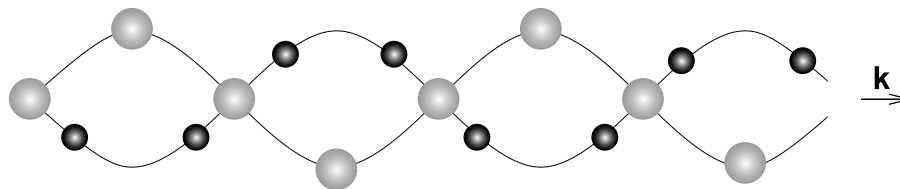


(b) Phonon optique

Figure 2.3 : Phonons longitudinaux dans un semiconducteur polaire. Les billes représentent des ions dont le type diffère selon la couleur.



(a) Phonon acoustique



(b) Phonon optique

Figure 2.4 : Phonons transversaux dans un semiconducteur polaire. Les billes représentent des ions dont le type diffère selon la couleur.

Comme le montre la courbe 2.5, la courbe de dispersion de la branche optique peut être

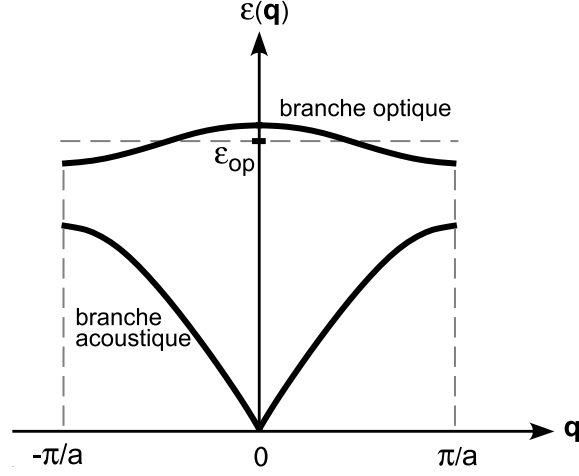


Figure 2.5 : Relation de dispersion pour les phonons d'un cristal de paramètre de maille égal à a . L'énergie de la branche optique peut être considérée comme constante quel que soit le vecteur d'onde \mathbf{q} .

simplifiée par une droite horizontale et, de fait, l'énergie du phonon optique peut être supposée constante quelle que soit la valeur du vecteur d'onde \mathbf{q} . Si l'on note ϵ_{op} l'énergie du phonon optique, on peut alors définir :

$$\epsilon_{op} = \hbar\omega_{op} = k_B\theta_{op} \quad (2.70)$$

où ω_{op} et θ_{op} sont respectivement la pulsation et la température du phonon optique. Ces valeurs sont caractéristiques du matériau considéré. En général, l'énergie du phonon optique est relativement importante par rapport à celle des porteurs libres. Par conséquent, les collisions optiques sont des collisions inélastiques et doivent être considérées comme telles dans le modèle.

Notons que nous devons distinguer les processus d'absorptions et les processus d'émissions. En effet, alors qu'un électron sera toujours en mesure d'absorber un phonon optique, il n'aura pas toujours l'énergie nécessaire pour en émettre un. De plus, comme le matériau est un alliage ternaire, nous considérons le réseau cristallin comme l'enchevêtrement de deux "sous-réseaux" de HgTe et de CdTe. Nous introduisons alors les collisions avec les phonons optiques polaires en considérant deux modes optiques différents constituant deux mécanismes distincts

[Gelmont *et al.*, 1992b], chaque mode correspondant à chaque sous-réseau. Dans ce travail nous appellerons mode 1 le mode correspondant au CdTe et mode 2 celui correspondant au HgTe. Chaque sous-réseau apporte sa contribution à la constante diélectrique du matériau, et la contribution de chacun peut être calculée à partir de la relation [Gelmont *et al.*, 1992b; Dubowski *et al.*, 1980] :

$$\kappa_i(x) = \kappa_\infty(x) \left[\left(\frac{\omega_{LO_i}}{\omega_{TO_i}} \right)^2 - 1 \right] \quad (2.71)$$

où κ_∞ est la contribution hautes fréquences à la fonction diélectrique, x la proportion de cadmium, ω_{TO} et ω_{LO} les pulsations propres aux modes transverses et longitudinaux respectivement, et avec $i = 1, 2$ correspondant aux sous-réseaux CdTe et HgTe respectivement. Les valeurs des pulsations des phonons ont été prises dans les références [Gelmont *et al.*, 1992b] et [Kim, 1993] et sont données dans le tableau 2.2. Dans le cas du MCT, nous ne prenons en

ω_{LO_1}	$2.92 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$
ω_{LO_2}	$2.62 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$
ω_{TO_1}	$2.81 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$
ω_{TO_2}	$2.28 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$

Tableau 2.2 : Pulsations des phonons optiques des sous-réseaux CdTe (1) et HgTe (2) dans les modes longitudinal (LO) et transverse (TO).

compte que la composante longitudinale [Kim, 1993] et, de fait, posons :

$$\omega_{\text{op}_i} = \omega_{LO_i} \quad (2.72)$$

La valeur de κ_∞ est reliée à la concentration de cadmium à travers la relation [Dubowski *et al.*, 1980] :

$$\kappa_\infty(x) = 10.4 - 3x \quad (2.73)$$

et vaut $\kappa_\infty \simeq 9.8$ dans le MCT (où $x \simeq 0.205$). Le taux de collision sur les phonons optiques

polaires est enfin donné en fonction de l'énergie électronique par [Fawcett *et al.*, 1970] :

$$P_{\text{op}_i}(\epsilon) = A_{\text{op}_i} \frac{1}{(1 + 2\alpha\epsilon)k} F_{\text{op}_i}(\epsilon, \epsilon') \times \left[N_{\text{op}_i} + \frac{1}{2} - j \times \frac{1}{2} \right] \quad (2.74)$$

où k est le module de \mathbf{k} , et avec

$$\epsilon' = \epsilon + j \times \hbar\omega_{\text{op}_i} \quad (2.75)$$

où ϵ' est l'énergie de l'électron après la collision et où $j = 1$ pour un processus d'absorption et $j = -1$ pour un processus d'émission. La grandeur N_{op} est le nombre d'occupation des phonons optiques polaires, vérifiant la relation :

$$N_{\text{op}} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{\text{op}}}{k_B T}\right) - 1} \quad (2.76)$$

La fonction F_{op_i} est quant à elle définie par :

$$F_{\text{op}_i}(\epsilon, \epsilon') = \frac{\left[A \ln \left| \frac{k' + k}{k' - k} \right| + B \right]}{C} \quad (2.77)$$

avec

$$A = [2(1 + \alpha\epsilon)(1 + \alpha\epsilon') + \alpha(\gamma + \gamma')]^2 \quad (2.78)$$

$$B = -2\alpha\sqrt{\gamma\gamma'}[4(1 + \alpha\epsilon)(1 + \alpha\epsilon') + \alpha(\gamma + \gamma')] \quad (2.79)$$

$$C = (1 + \alpha\epsilon)(1 + \alpha\epsilon') \quad (2.80)$$

et

$$A_{\text{op}_i} = \frac{e^2 m_c \omega_{\text{op}}}{16\pi \hbar^2 \kappa_0 \kappa_i^*} \quad (2.81)$$

où κ_i^* , la constante diélectrique effective, vérifie [Gelmont *et al.*, 1992b] :

$$\frac{1}{\kappa_i^*} = \frac{1}{\kappa_\infty(x)} - \frac{1}{\kappa_\infty(x) + \kappa_i(x)} \quad (2.82)$$

et où κ_i correspond à la contribution à la constante diélectrique du mode i .

Le désordre de l'alliage

Le désordre d'alliage est introduit à travers l'approximation du cristal virtuel [Ridley, 1999]. Dans le cas du HgCdTe, si l'on suppose les ions Hg et Cd distribués de façon uniforme et ordonnée sur le réseau des cations, le potentiel du réseau peut être considéré comme la répétition d'une structure périodique correspondant à la moyenne des potentiels des différents constituants, pondérée par leurs proportions respectives. Dans la réalité, l'arrangement des cations n'est pas parfaitement ordonné et il convient de rajouter à la structure périodique une partie aléatoire rendant compte de la différence de potentiels entre le cristal réel et le cristal virtuel [Harrison et Hauser, 1976]. Cette partie aléatoire forme alors un potentiel de perturbation qui permet de calculer la matrice de transition électronique. Les transitions dues au désordre d'alliage sont élastiques, et leurs probabilités d'occurrence sont données par [Gelmont *et al.*, 1992b] :

$$P(\epsilon) = \frac{x(1-x)\Delta\epsilon_c^2 m_c}{\pi \hbar^4 N_{\text{cat}} \epsilon_g} \frac{\sqrt{2m_c} \gamma (\epsilon_g^2 + 2\epsilon_g \epsilon + \frac{3}{2}\epsilon^2)}{2\epsilon + \epsilon_g} \quad (2.83)$$

où N_{cat} est la densité de cations et $\Delta\epsilon_c$ l'offset des bandes de conduction vérifiant :

$$\Delta\epsilon_c = \epsilon_c(\text{CdTe}) - \epsilon_c(\text{HgTe}) = \Delta\epsilon_g + \Delta\epsilon_v \quad (2.84)$$

où $\Delta\epsilon_g$ est la différence entre les gaps du CdTe et du HgTe, et $\Delta\epsilon_v$ l'offset des bandes de valences. Nous prenons dans notre cas $\Delta\epsilon_v = -0.350$ eV [Johnson *et al.*, 1988].

Calcul de N_{cat}

Puisque nous connaissons la densité du matériau ainsi que les masses atomiques de chaque

composant, nous pouvons en déduire N_{cat} , la densité de cations dans le matériau. En effet, la masse molaire du matériau est donnée comme une fonction de sa composition par la relation :

$$\mathcal{M}_{\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}} = (1-x) \times \mathcal{M}_{\text{HgTe}} + x \times \mathcal{M}_{\text{CdTe}} \quad (2.85)$$

et donc

$$\mathcal{M}_{\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}} = 0.328(1-x) + 0.240x \quad (2.86)$$

La densité de cations est alors directement donnée par le nombre de moles de $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ par :

$$N_{\text{cat}} = \frac{\rho}{\mathcal{M}_{\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}}} \times \mathcal{A} \quad (2.87)$$

où \mathcal{A} est le nombre d'Avogadro.

Les impuretés ionisées

Nous introduisons les impuretés ionisées par le biais du modèle de Brooks-Herring, particulièrement adapté aux cas, tels que le notre, où il y a peu ou pas de compensation [Reggiani, 1985]. Dans cette approche, les impuretés sont supposées distribuées de manière uniforme dans tout le réseau cristallin. Du fait de leurs charges, celles-ci créent un potentiel coulombien à longue portée, en mesure d'interagir avec l'ensemble des charges libres. Toutefois, les électrons se trouvant à la périphérie d'une impureté forment un écran à sa charge réduisant ainsi son effet sur les électrons se trouvant plus loin. Du fait de cet écran, on considère le potentiel coulombien de chaque impureté ionisée comme décroissant en $\exp(-q_s r)$, où q_s^{-1} , la longueur d'écran, obéit à la relation :

$$q_s^2 = \frac{e^2 n}{\kappa_0 \kappa_r k_B T} \quad (2.88)$$

n étant la densité d'électrons libres, e la charge élémentaire, κ_0 la permittivité du vide, κ_r la constante diélectrique statique relative du matériau, k_B la constante de Boltzmann, et T la

température du réseau. Ce potentiel est alors ramené à :

$$V(r) = \frac{Ze^2}{\kappa_0 \kappa_r r} \exp(-q_s r) \quad (2.89)$$

où Z est la quantité de charges de l'impureté que nous prendrons, dans notre cas, égale à l'unité et r la distance. Pour connaître la valeur de la constante diélectrique statique κ_r , nous devons prendre en compte les deux modes des sous-réseaux précédemment décrits ainsi que la contribution haute fréquence. De fait, κ_r est donnée par [Gelmont *et al.*, 1992b] :

$$\kappa_r = \kappa_\infty(x) + \kappa_1(x) + \kappa_2(x) \quad (2.90)$$

Les collisions avec les impuretés ionisées sont par nature élastiques [Jacoboni et Reggiani, 1983]. Leur taux d'occurrence est finalement donné par [Fadel, 1988] :

$$P_{\text{imp}}(\epsilon) = A_{\text{imp}} \frac{k}{1 + 2\alpha\epsilon} F_{\text{imp}}(\epsilon, n_I) \quad (2.91)$$

où n_I est la densité d'impuretés ionisées et avec

$$F_{\text{imp}}(\epsilon, N_I) = \frac{2f_2^2}{(4k^2 + q_s^2)q_s^2} + 2f_1^2 + \frac{f_1 f_2}{k^2} \times \ln \left(\frac{q_s^2}{4k^2 + q_s^2} \right) \quad (2.92)$$

où

$$f_1 = \frac{\alpha\epsilon}{2k^2} \quad (2.93)$$

et

$$f_2 = 1 + 2\alpha\epsilon + f_1 q_s^2 \quad (2.94)$$

et avec

$$A_{\text{imp}} = \frac{e^4 N_I m_c}{2\pi \kappa_0^2 \kappa_r^2 \hbar^3} \quad (2.95)$$

Dans le $\text{Hg}_{0.795}\text{Cd}_{0.205}\text{Te}$, à 77 K, l'ensemble des donneurs sont ionisés [Capper, 1994]. De plus, les densités de trous et d'accepteurs sont négligeables devant la densité électronique n .

De fait, nous prenons dans ce travail $n_I \simeq n$.

2.3.4 États après collisions

Une fois déterminé le type de collision subi par un électron à partir des probabilités de collisions présentées précédemment, il reste à déterminer son état $|\mathbf{k}'\rangle$ après la collision. Celui-ci est déterminé à partir de l'état initial $|\mathbf{k}\rangle$ et des probabilités de transition $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ propres à chaque type de collision et présentées à la section 2.3.1. Dans le cas d'une simulation Monte Carlo, cet état final est déterminé à partir des angles formés par les vecteurs $(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, comme représenté sur la figure 2.6. L'azimut ϕ , compris entre 0 et 2π , ainsi que l'angle de déflexion θ , pouvant varier entre 0 et π , sont déterminés à l'aide de deux nombres aléatoires r_1 et r_2 , tirés indépendamment l'un de l'autre et de façon équiprobable entre 0 et 1. L'azimut est alors distribué de façon isotrope selon la relation :

$$\phi = 2\pi r_1 \quad (2.96)$$

L'angle de déflexion obéit quant à lui à une distribution rendant compte de la probabilité de

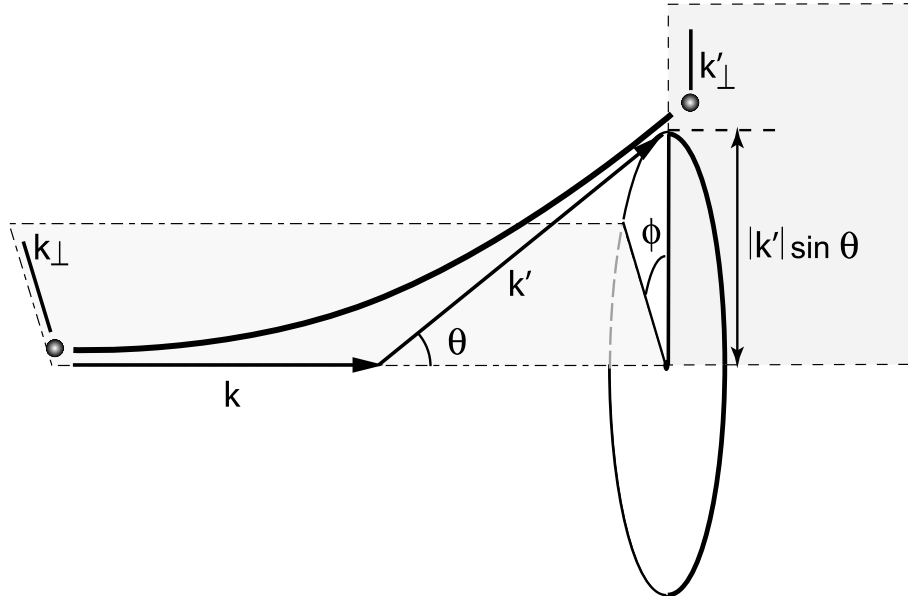


Figure 2.6 : Angles de diffusion.

transition $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. De fait, θ est déterminé à l'aide de la relation :

$$r_2 = \frac{\int_0^\theta P(\theta') d\theta'}{\int_0^\pi P(\theta') d\theta'} \quad (2.97)$$

où $P(\theta)$ est la probabilité pour que l'angle de déflexion prenne la valeur θ . Comme on peut le remarquer sur la figure 2.6, cette probabilité est proportionnelle au nombre d'états se trouvant sur le cercle de rayon $|\mathbf{k}'| \sin \theta$ et, de fait, $P(\theta) = A \sin \theta$ où A est une constante de normalisation. En fonction de la complexité de l'expression de $P(\theta)$, l'angle θ est extrait de la relation (2.97) à l'aide de la méthode directe ou de la méthode du rejet, décrites dans l'annexe A. Exprimons à présent les probabilités $P(\theta)$ pour les différents mécanismes de collision considérés.

2.3.4.1 Phonons optiques polaires

La probabilité $P_{\text{imp}}(\theta)$ est donnée dans le cas des phonons optiques polaires par la relation [Fawcett *et al.*, 1970] :

$$P_{\text{op}}(\theta) = \frac{\left(\sqrt{\gamma(\epsilon)\gamma(\epsilon')} + \alpha\epsilon\epsilon' \cos \theta \right)^2}{\gamma(\epsilon) + \gamma(\epsilon') - 2\sqrt{\gamma(\epsilon)\gamma(\epsilon')} \cos \theta} \sin \theta \quad (2.98)$$

Cette expression met en évidence l'anisotropie de l'interaction avec les optiques polaires, due à sa nature électrostatique [Reggiani, 1985].

2.3.4.2 Désordre d'alliage

Dans le cas des transitions électroniques dues au désordre de l'alliage ternaire, la probabilité $P_{\text{all}}(\theta)$ s'exprime comme [Kim, 1993] :

$$P_{\text{all}}(\theta) = [1 + \alpha\epsilon(1 + \cos \theta)]^2 \sin \theta \quad (2.99)$$

2.3.4.3 Impuretés ionisées

Dans le cas des impuretés ionisées, la probabilité $P_{\text{imp}}(\theta)$ vérifie la relation [Kim, 1993] :

$$P_{\text{imp}}(\theta) = \left[\frac{1 + \alpha\epsilon(1 + \cos \theta)}{1 + (q_s/2k)^2 - \cos \theta} \right]^2 [1 + \alpha\epsilon(1 + \cos \theta)]^2 \sin \theta \quad (2.100)$$

Remarquons que, de par sa nature électrostatique, l'interaction avec les impuretés ionisées perd de son efficacité à mesure que l'énergie électronique augmente [Reggiani, 1985].

2.4 Modélisation des processus de génération-recombinaison dans le MCT

Dans ce travail, les ondes hyperfréquences sont modélisées par des champs oscillants venant se superposer au champ électrique initial. Or, nous avons vu, dans le chapitre précédent, combien les processus de génération-recombinaison influencent le comportement électronique du MCT, et ce à partir de champs électriques relativement faibles puisque d'environ 150 à 200 V/cm. Par conséquent, la description des effets des micro-ondes sur le transport de charges dans le matériau nécessite la prise en compte dans notre modèle des phénomènes de génération-recombinaison. Parmi ces phénomènes, nous avons souligné la prépondérance des processus Auger et plus particulièrement du mode de recombinaison CCCH. Nous ne modélisons donc que ce dernier et négligeons les contributions des autres processus Auger et des processus radiatifs et Shockley-Read-Hall. De plus, nous ne considérons, dans le cadre de la génération, que les phénomènes d'ionisation initiés par les électrons, la participation des trous ayant été montrée négligeable.

Avant d'aller plus loin, nous devons souligner le fait que les temps caractéristiques des processus de génération-recombinaison Auger sont très grands devant ceux des mécanismes de collision précédemment décrits. Par conséquent, une étude systématique de la réponse de la densité électronique à des signaux statiques ou dynamiques menée à partir d'un simulateur Monte Carlo s'avère vite prohibitive au vu des temps de simulations importants demandés. Toutefois, le calcul des paramètres nécessaires à la mise en place d'une modélisation macro-

scopique reste possible en des temps raisonnables.

L'évolution temporelle de la densité électronique est décrite par l'*équation de balance* des phénomènes de génération et de recombinaison. Celle-ci est obtenue à partir des expressions (1.33) et (1.37) et vérifie la relation [Dmitriev et Mocker, 1995] :

$$\frac{dn}{dt} = gn - Rn^2p \quad (2.101)$$

où g le taux de génération et R le taux de recombinaison. Dans le cadre d'une approche hydrodynamique, les équations de conservation de la vitesse et de l'énergie sont dressées à partir des relations (2.52) et (2.54) en considérant un matériau homogène, et de fait en annulant tous les opérateurs de dérivation spatiale. Ainsi [Shur, 1976] :

$$\frac{d\bar{\mathbf{v}}}{dt} = \frac{q\mathbf{E}}{m^*} - \frac{\bar{\mathbf{v}}}{\tau_v} \quad (2.102)$$

pour la vitesse et

$$\frac{d\bar{\epsilon}}{dt} = q\mathbf{E}\bar{\mathbf{v}} - \frac{\bar{\epsilon} - \epsilon_0}{\tau_\epsilon} \quad (2.103)$$

pour l'énergie. Il reste à déterminer les paramètres g et R . Si ce dernier a été mesuré expérimentalement et peut être supposé indépendant du champ électrique et égal à $R = 10^{-24} \text{ cm}^6\text{s}^{-1}$ dans les conditions considérées, il reste à déterminer le taux de génération. Pour ce faire, nous introduisons dans le simulateur Monte Carlo une probabilité de collision ionisante reposant sur l'approche phénoménologique de Keldysh [Keldysh, 1965] et donnée par la relation [Canali *et al.*, 1996] :

$$P_{\text{impact}}(\epsilon) = P_{ii} \left(\frac{\epsilon - \epsilon_{\text{th}}}{\epsilon_{\text{th}}} \right)^\psi \quad (2.104)$$

où P_{ii} et ψ sont des paramètres ajustables dont nous déterminerons les valeurs, à l'aide de données expérimentales, à la section 3.3.1 (page 113). La grandeur ϵ_{th} est l'énergie de seuil d'ionisation, donnée par l'équation 1.36 (page 44). Les états après collisions sont quant à eux calculés de la même façon que dans le cas des impuretés ionisées (voir paragraphe 2.3.4.3).

Remarquons qu'il existe des approches plus complexes que celle que nous utilisons ici pour

traiter l'ionisation par impact dans les semiconducteurs [Cavassilas, 2000; Mouton, 1996]. Toutefois, ce travail présentant une première étude microscopique des processus de génération Auger dans le MCT, nous avons préféré mettre en oeuvre une méthode plus simple, d'autant plus que très peu d'informations concernant ce matériau sont disponibles dans la littérature.

Conclusion

Le transport électronique dans les dispositifs semiconducteurs est décrit par l'équation de Boltzmann couplée à l'équation de Poisson. Une extraction analytique de la fonction de distribution étant dans la plupart des cas impossible, le recours à la méthode des moments présente une alternative intéressante dont dérivent les modèles dérive-diffusion et hydrodynamique décrits dans ce chapitre. Ces derniers permettent la simulation de dispositifs complexes dans des temps de calculs raisonnablement courts et sont de fait très utilisés, aussi bien dans le milieu industriel qu'universitaire. Toutefois, ne procédant pas à une résolution directe de l'équation de Boltzmann, ils nécessitent la connaissance préalable de paramètres de transport stationnaires qu'il s'agit d'extraire de mesures, lorsque c'est possible, ou bien de simulations microscopiques. Dans le cas du MCT, très peu d'études ont été menées au niveau du comportement électronique du matériau et, de fait, cette étape d'extraction reste à faire. À cet effet, nous avons mis en place un modèle microscopique basé sur la méthode de Monte Carlo que nous avons appliquée au cas du transport électronique. Ce modèle prend en compte les différents types de collisions qui influencent le transport électronique dans le matériau d'intérêt ainsi que la dégénérescence. Nous avons de fait explicité leurs probabilités d'occurrence ainsi que celles liées aux transitions d'états qu'ils impliquent. Trois mécanismes d'interaction ont été considérés qui sont engendrés par les deux modes optiques, le désordre d'alliage et les impuretés ionisées. Enfin, au vu de l'importance des phénomènes de génération et de recombinaison dans le MCT, nous avons mis en place un modèle permettant de décrire l'évolution dans le temps de la densité électronique et reposant sur les méthodes de simulations décrites.

Ces modèles seront utilisés par la suite pour décrire le comportement électronique du MCT en régimes statique, petit-signal et grand-signal.

Chapitre 3

Étude du régime statique

Sommaire

Introduction	88
3.1 Les probabilités de collision	89
3.2 Calcul de la fonction de distribution et des paramètres cinétiques	90
3.2.1 La fonction de distribution	92
3.2.2 L'énergie moyenne	94
3.2.3 La vitesse de dérive	98
3.2.4 La mobilité	101
3.2.5 La masse effective moyenne	104
3.2.6 Taux de relaxation de la vitesse et de l'énergie	107
3.2.7 Grandeurs transitoires	109
3.3 Évolution de la densité de porteurs	111
3.3.1 Détermination préalable des paramètres P_{ii} et ψ	113
3.3.2 Détermination du taux de génération g	113
3.3.3 Résolution de l'équation balance	116
3.4 Etude du bruit	123
3.4.1 Fonction d'autocorrélation et densité spectrale de bruit de diffusion	124
3.4.2 Coefficient et longueur de diffusion	130
Conclusion	134

Introduction

L'étude en régime statique des paramètres de transport électronique est indispensable, d'une part pour pouvoir mettre correctement en place les outils de simulation à partir des données expérimentales disponibles, mais aussi pour évaluer l'influence des phénomènes physiques mis en jeu.

Nous avons décrit, dans le chapitre précédent, différents modèles permettant de simuler le transport électronique dans le MCT et avons vu que le modèle hydrodynamique est le candidat idéal pour décrire le régime dynamique avec une excellente précision tout en gardant des temps de calcul raisonnables. Toutefois, les données disponibles dans la littérature ne permettent pas de le mettre directement en oeuvre et le calcul préalable des paramètres d'entrée à l'aide d'une approche Monte Carlo s'avère nécessaire. En effet, nous cherchons à établir quels peuvent être les effets d'une onde électromagnétique hyperfréquence de forte puissance sur le comportement électronique du matériau. L'énergie des photons associés aux radiations micro-ondes étant trop petite pour qu'elles puissent participer aux processus de photo-génération électronique, les hyperfréquences agissent sur la dynamique des porteurs de charges libres. De plus, la participation du champ magnétique étant négligeable devant celle du champ électrique, les ondes incidentes sont modélisées sous la forme de champs électriques venant se superposer au champ régnant déjà au sein du matériau. Dans ces conditions, l'évaluation des effets des micro-ondes se ramène à une étude du comportement électronique du matériau, notamment en régime dynamique (impulsions, petit-signal, grand-signal, etc.).

Après avoir calculé les probabilités d'occurrence des différents mécanismes de collision influençant le transport électronique, nous extrairons les grandeurs stationnaires que sont la fonction de distribution, la vitesse de dérive, l'énergie moyenne, la mobilité et la masse effective moyenne, à l'aide de notre simulateur Monte Carlo. Ces paramètres nous permettront ensuite de mettre en place un simulateur hydrodynamique capable de simuler correctement la vitesse et l'énergie des électrons en régime transitoire. Après avoir déterminé de façon microscopique le taux de génération électronique, l'évolution dans le temps de la densité

d'électrons, sujette aux phénomènes de génération-recombinaison Auger, pourra être décrite. Enfin, nous nous intéresserons au bruit, dont la simulation peut être faite de façon naturelle à travers la méthode de Monte Carlo. En effet, il est étroitement lié au coefficient de diffusion, paramètre de transport très utile dans le domaine de la simulation mais difficile à extraire expérimentalement.

3.1 Les probabilités de collision

Le calcul préalable des probabilités de collisions est essentiel dans le cadre d'une approche Monte Carlo puisque ce sont elles qui servent à décrire la physique des phénomènes microscopiques influençant le transport électronique. Nous avons donc calculé, à partir des expressions données dans la section 2.3.3 (page 74), les taux d'occurrence des différents mécanismes de collision intervenant dans le MCT. Ces mécanismes sont les transitions électroniques dues à l'absorption et à l'émission des deux modes de phonons optiques polaires, les interactions avec les impuretés ionisées, les transitions dues au désordre d'alliage ainsi que l'ionisation par impact. Nous rappelons que, conformément aux études déjà effectuées [Gelmont *et al.*, 1992b], la contribution des phonons acoustiques a été négligée. Nous avons reporté sur la figure 3.1 les probabilités de collisions obtenues pour une densité électronique $n = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et une température de 77 K. Sur ces résultats, nous pouvons identifier trois régions, la première correspondant aux énergies électroniques comprises entre 0 et 30 meV. Dans cette zone, les collisions avec les impuretés ionisées sont prépondérantes. Ce n'est plus le cas dans la deuxième partie, correspondant à des énergies comprises entre 30 et 200 meV environ, où ce sont les collisions avec les phonons optiques polaires du mode HgTe qui sont prédominantes. Remarquons toutefois que les probabilités de collision avec les impuretés ionisées restent importantes dans cette région, et par ailleurs supérieures au taux d'émission de phonons optiques polaires du mode CdTe. La troisième et dernière partie concerne les énergies électroniques supérieures à 200 meV pour lesquelles les collisions ionisantes via le processus de génération Auger sont les plus probables. Remarquons que ces énergies sont très élevées et que, par conséquent, très peu d'électrons sont en mesure de les atteindre en conditions

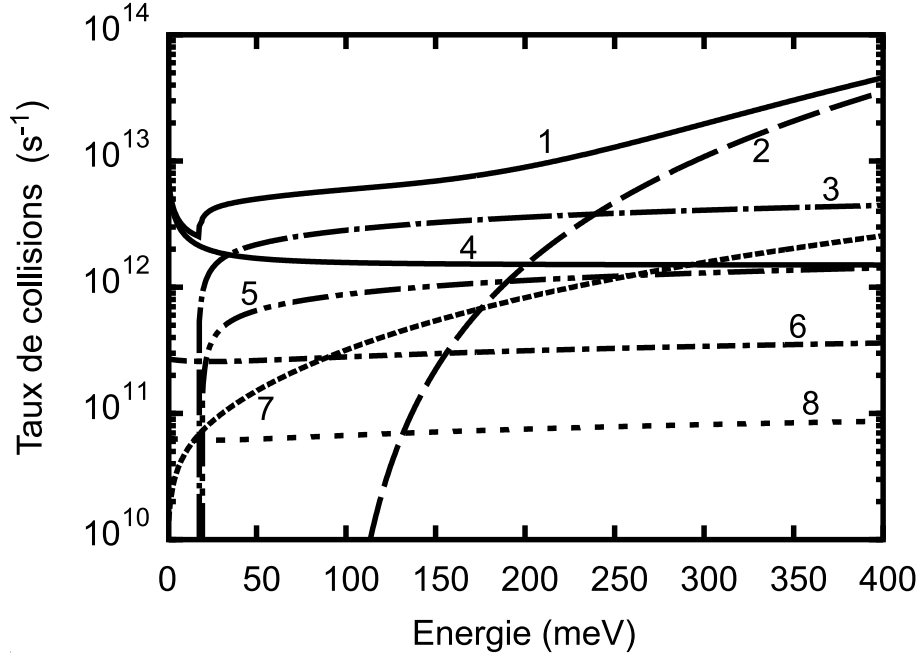


Figure 3.1 : Probabilités de collision en fonction de l'énergie des porteurs pour $n = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Les courbes 1 à 8 représentent la probabilité totale (1), l'ionisation par impact (2), les deux modes d'émission de phonons optiques HgTe et CdTe (respectivement 3 et 5), les impuretés ionisées (4), les deux modes d'absorption de phonons optiques polaires HgTe et CdTe (respectivement 6 et 8) et le désordre d'alliage (7).

proches de l'équilibre thermodynamique.

3.2 Calcul de la fonction de distribution et des paramètres cinétiques

À partir des données cristallographiques et électroniques recensées dans les chapitres précédents ainsi que des probabilités d'occurrence des différents mécanismes de collision, nous avons calculé la fonction de distribution électronique ainsi que les paramètres cinétiques de transport dans le MCT. Nous considérons ici comme paramètres cinétiques les grandeurs vitesse, énergie, mobilité et masse effective électronique. La densité électronique fera l'objet d'une étude à part. Les valeurs des différents paramètres utilisés par notre simulateur Monte Carlo sont reportées dans le tableau 3.1.

Symbole	Grandeur	Valeur
α	Coefficient de non-parabolicité	10.4 eV^{-1}
Δ	Énergie de split-off	1 eV
Δt	Pas sur le temps	10^{-14} s
$\Delta\epsilon_c$	Offset des bandes de conduction	1.55 eV
ϵ_g	Largeur de bande interdite	91 meV
ϵ_{th}	Énergie de seuil pour l'ionisation par impact	92 meV
κ_∞	Constante diélectrique relative hautes fréquences	9.8
κ_r	Constante diélectrique relative statique	13.7
m_c	Masse effective des électrons en fond de vallée Γ	0.007
N_{cat}	Densité de cations	$1.48 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$
n_i	Densité intrinsèque de porteurs	$5.75 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$
ω_{op1}	Pulsation du phonon optique polaire, mode CdTe	$2.92 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$
ω_{op2}	Pulsation du phonon optique polaire, mode HgTe	$2.62 \times 10^{13} \text{ s}^{-1}$
P	Élément de matrice de Kane	$8.28 \times 10^{-10} \text{ eVm}$
P_{ii}	Paramètre pour l'ionisation par impact	10^{12} s^{-1}
ψ	Paramètre pour l'ionisation par impact	3
T	Température du réseau	77 K
x	Proportion de cadmium	0.205

Tableau 3.1 : Valeurs des différents paramètres d'entrée du simulateur Monte Carlo.

Nous avons vu dans les chapitres précédents que le temps caractéristique des processus de génération et de recombinaison Auger est de l'ordre de la microseconde. Or, la figure 3.1 montre que tous les taux de collisions sont inférieurs à environ 10^{14} s^{-1} et que, par conséquent, leur temps caractéristique est de l'ordre de la picoseconde. Cette grande différence entre les constantes de temps implique que les paramètres cinétiques sont contrôlés par les processus de collision et ne subissent pas les effets de la génération-recombinaison.

De plus, la prise en compte des processus Auger n'est pas nécessaire pour le calcul de la fonction de distribution puisqu'ils n'ont que des effets négligeables sur celle-ci [Gelmont *et al.*, 1992a].

Par conséquent, dans un premier temps, nous ne prenons pas en compte les processus de

3.2.1 La fonction de distribution

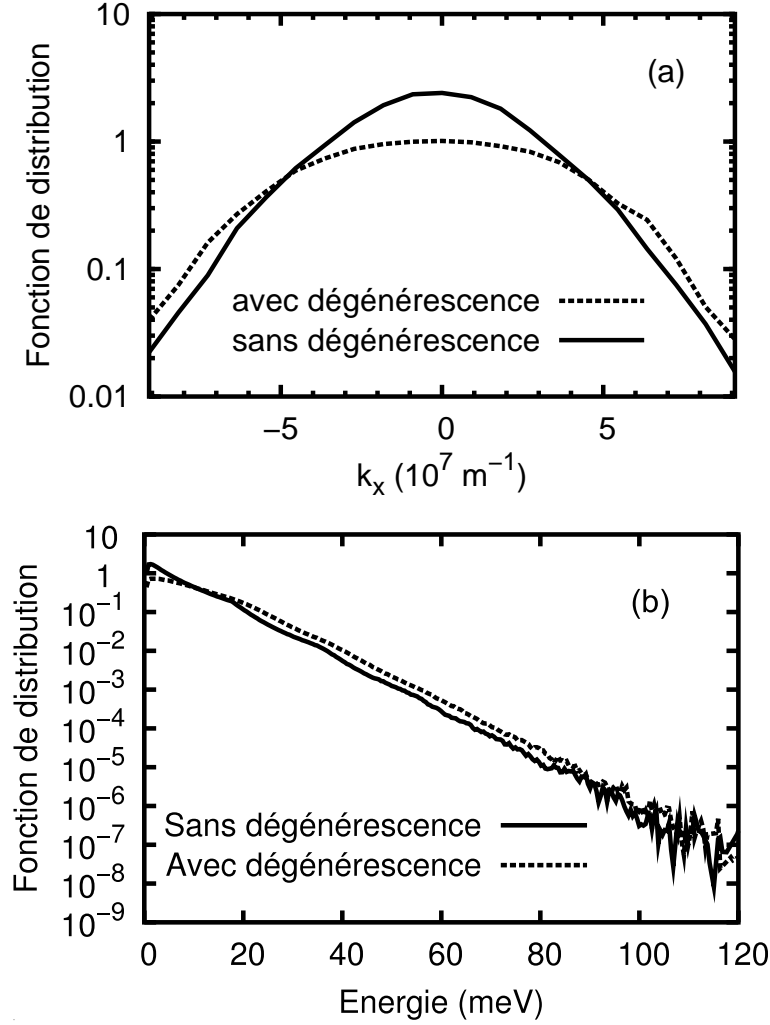


Figure 3.2 : Fonction de distribution électronique à l'équilibre thermodynamique en fonction de la composante k_x du vecteur d'onde (a) et en énergie (b), pour du MCT avec $n = 5.4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et pour une température de 77 K. La direction x est celle dans laquelle est appliquée le champ électrique. Les courbes en pointillés et en traits continus correspondent respectivement aux calculs effectués avec et sans prise en compte de la dégénérescence.

Nous avons reporté sur la figure 3.2 la fonction de distribution des électrons à l'équilibre thermodynamique en fonction de la composante k_x du vecteur d'onde (a) et en énergie (b),

pour une densité de porteurs libres $n = 5.4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Dans le but de mettre en évidence les effets de la dégénérescence, nous présentons deux courbes : l'une négligeant et l'autre prenant en compte ce phénomène. Nous pouvons remarquer que lorsque la dégénérescence n'est pas considérée, les valeurs de la fonction de distribution aux faibles valeurs de k_x dépassent l'unité, impliquant une probabilité d'occupation des états concernés supérieure à un. Cela ne correspond à aucune réalité physique mais montre toutefois que la dégénérescence ne peut être ignorée si l'on veut décrire correctement le transport électronique pour cette densité électronique. En effet, lorsque la dégénérescence est introduite, cette anomalie est corrigée, et la fonction de distribution est bien inférieure à un quelle que soit la valeur de k_x . En contrepartie, les états dont les vecteurs d'ondes sont en valeurs absolues supérieurs à environ $5 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ ont des probabilités d'occupation plus grandes puisque les électrons qui, du fait du principe d'exclusion de Pauli, ne peuvent trouver de place dans les états occupés, migrent vers des états d'énergies plus élevées [voir figure 3.2(b)].

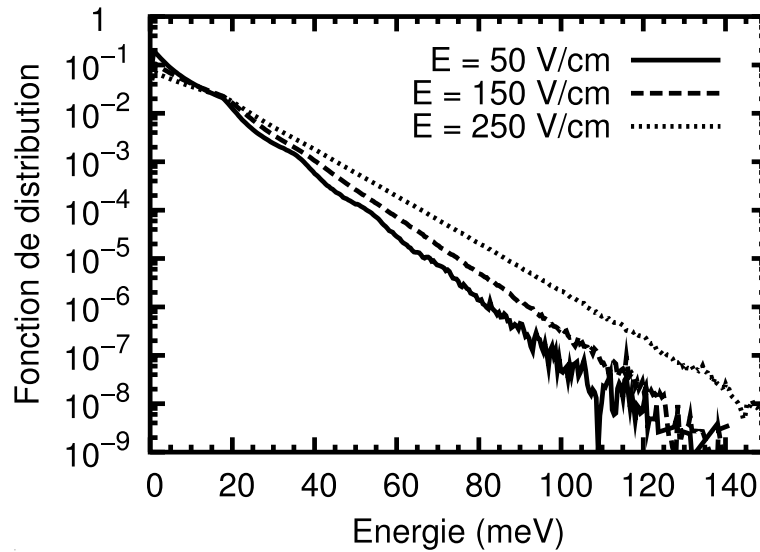


Figure 3.3 : Fonction de distribution en énergie pour du MCT avec $n = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ à 77 K et pour différents champs électriques.

Nous avons reporté dans la figure 3.3 les fonctions de distribution en énergie, obtenues pour une densité électronique $n = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et pour des champs électriques de 50, 150 et 250 V/cm. En vertu de la discussion faite au paragraphe 1.2.4, nous avons négligé les effets

de la dégénérescence pour cette concentration.

Nous pouvons remarquer que la fonction de distribution décroît fortement avec l'énergie électronique. En effet, les électrons ont tendance à se relaxer vers les énergies les plus basses. Toutefois, si l'on regarde les états de hautes énergies, on remarque que leur probabilité d'occupation varie avec champ électrique. En effet, plus le champ électrique est important, plus les électrons sont en mesure d'accumuler de l'énergie. De fait, ils peuvent atteindre des états d'énergies plus élevées, ce qui rend la probabilité d'occupation de ces derniers plus importante.

Remarquons que, pour les valeurs les plus élevées de l'énergie, la fonction de distribution telle que nous l'avons calculée perd de sa précision. En effet, à travers l'approche Monte Carlo et la simulation directe de la dynamique des porteurs de charges, plus l'énergie d'un état est élevée, plus le nombre d'électrons en mesure de l'atteindre est faible. La statistique se trouve de fait appauvrie aux énergies les plus hautes. Toutefois, la fonction de distribution peut être ramenée pour les *hautes énergies* à une maxwellienne correspondant à une température T_e et de fait approchée par une expression de la forme [Gelmont *et al.*, 1992a] :

$$f(\epsilon) = A \exp\left(-\frac{\epsilon}{k_B T_e}\right) \quad (3.1)$$

où T_e est la température électronique. Une comparaison entre la fonction de distribution calculée et son approche analytique est faite sur la figure 3.4 pour des champs électriques de 50, 150 et 250 V/cm. À toutes fins utiles, nous avons déterminé à partir des résultats obtenus avec notre simulateur Monte Carlo les valeurs de A et de $k_B T_e$ pour différents champs électriques et pour $n = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, et nous les avons reportées dans le tableau 3.2.

3.2.2 L'énergie moyenne

Nous avons calculé l'énergie moyenne électronique à l'aide de l'algorithme décrit dans l'annexe B et l'avons reportée en fonction du champ électrique et pour différentes densités d'électrons libres sur la figure 3.5. Nous rappelons que, en vertu de ce que nous avons dit dans la section 2.3.3 (page 74), nous prenons la densité d'impuretés ionisées n_I égale à la densité électronique n .

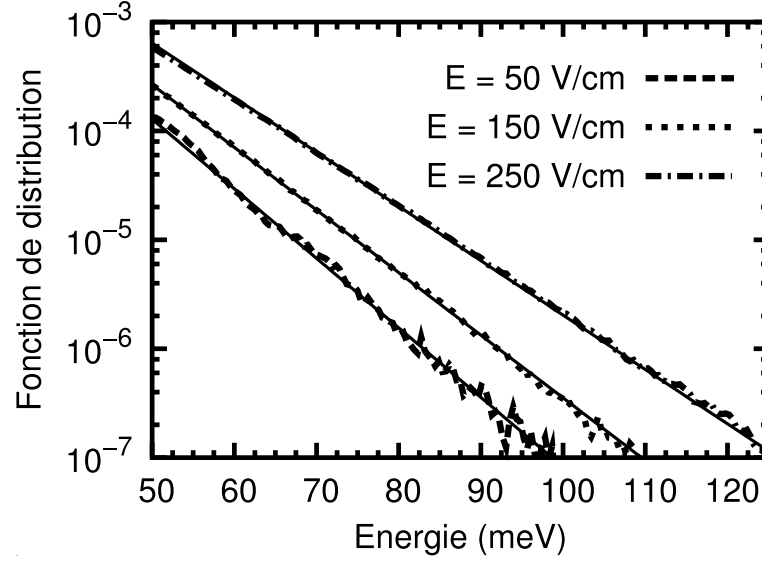


Figure 3.4 : Fonction de distribution en énergie et son approximation par une maxwellienne pour dans le MCT avec $n = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, à 77 K et pour différents champs électriques.

Champ électrique (V/cm)	A	$k_B T_e$ (meV)
10	0.195	6.75
50	0.182	6.87
100	0.228	7.00
150	0.256	7.28
200	0.192	8.10
250	0.155	8.98
300	0.139	9.82
350	0.093	11.3

Tableau 3.2 : Valeurs utilisées pour approcher la fonction de distribution par une maxwellienne, pour une densité d'électrons libres $n = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

Quelle que soit la densité d'électrons libres, la courbe de l'énergie moyenne des électrons en fonction du champ électrique peut être décomposée en deux parties. La première d'entre elles correspond aux champs électriques inférieurs à 50 V/cm, pour lesquels l'énergie moyenne reste quasiment constante. Dans ce cas, le champ électrique est peu élevé et les différentes collisions suffisent à dissiper l'énergie qu'il transmet aux électrons libres. L'échange énergétique entre

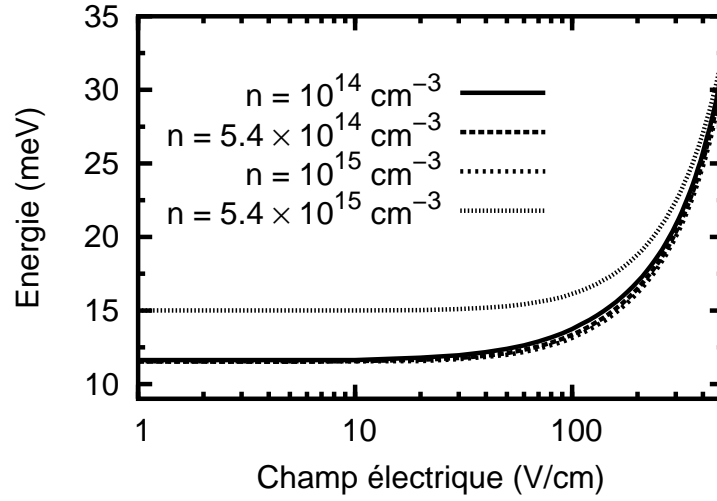


Figure 3.5 : Energie moyenne des porteurs en fonction du champ électrique pour différentes densités d'électrons libres.

le gaz électronique et le réseau est alors équilibré et la valeur de l'énergie moyenne est celle de l'équilibre thermodynamique ϵ_0 . Nous pouvons remarquer sur la figure 3.5 que cette énergie est plus élevée lorsque la densité d'électrons libres vaut $n = 5.4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. C'est là l'un des effets de la dégénérescence qui, comme nous l'avons vu dans la section 3.2.1, pousse les électrons libres à migrer vers les états d'énergies plus élevées. Remarquons que, en l'absence de dégénérescence et en considérant une bande de conduction parabolique, l'énergie à l'équilibre thermodynamique vérifie la relation :

$$\epsilon_0 = \frac{3}{2} k_B T \quad (3.2)$$

avec $T = 77 \text{ K}$. Dans le MCT, si l'on considère les densités d'électrons libres pour lesquelles la dégénérescence peut être occultée, la forte non-parabolicité de la bande de conduction ramène cette énergie à $\epsilon_0 = 12 \text{ meV}$ au lieu d'environ 10 meV .

La deuxième partie de la courbe de l'énergie moyenne correspond aux champs électriques supérieurs à 50 V/cm . On peut observer dans cette zone une augmentation de l'énergie moyenne avec le champ électrique. En effet, lorsque celui-ci devient suffisamment important, les collisions ne suffisent plus à dissiper l'énergie qu'il apporte aux électrons. Leur énergie

moyenne augmente alors, en même temps que le nombre de collisions inélastiques, jusqu'à ce qu'un nouvel équilibre soit obtenu. La relation (3.2) n'est de fait plus valable et doit être remplacée par l'expression :

$$\bar{\epsilon} = \frac{3}{2}k_B T_e \quad (3.3)$$

où T_e est la température électronique. Du fait de l'augmentation de l'énergie moyenne, cette température devient supérieure à la température T du réseau cristallin. Tout se passe alors comme si les électrons chauffaient de plus en plus au fur et à mesure que le champ électrique augmente. On dit dans ce cas que le transport électronique se fait en *régime de porteurs chauds*.

Dans le MCT, l'énergie des phonons optiques polaires se situe autour de 20 meV. L'énergie électronique dissipée par chacune de leurs émissions est de fait peu importante. Les collisions avec les phonons ne sont alors plus en mesure de thermaliser les électrons à partir de champs relativement faibles, en l'occurrence de 50 V/cm.

Dans le but de faciliter l'utilisation des courbes d'énergie moyenne que nous avons calculées dans des simulateurs commerciaux utilisant des paramètres d'entrée sous formes analytiques, nous avons approché celles-ci par des expressions de la forme [Ali Omar et Reggiani, 1987] :

$$\bar{\epsilon}(E) = \epsilon_0 \left[1 + \left(\frac{E}{E_c} \right)^\beta \right]^\zeta \quad (3.4)$$

Les valeurs des paramètres utilisés dans la relation 3.4 sont reportées pour les différentes densités électroniques considérées dans le tableau 3.3. À titre de comparaison, les valeurs de

$n \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	$\epsilon_0 \text{ (meV)}$	$E_c \text{ (V/cm)}$	β	ζ
10^{14}	11.54	148	2.20	0.35
5.4×10^{14}	11.54	218	1.95	0.56
10^{15}	11.60	268	1.76	0.69
5.4×10^{15}	14.97	494	1.65	1.1

Tableau 3.3 : Valeurs des paramètres utilisés pour exprimer analytiquement l'énergie moyenne.

l'énergie moyenne calculées par le simulateur Monte Carlo et les courbes analytiques ont été reportées sur la figure 3.6.

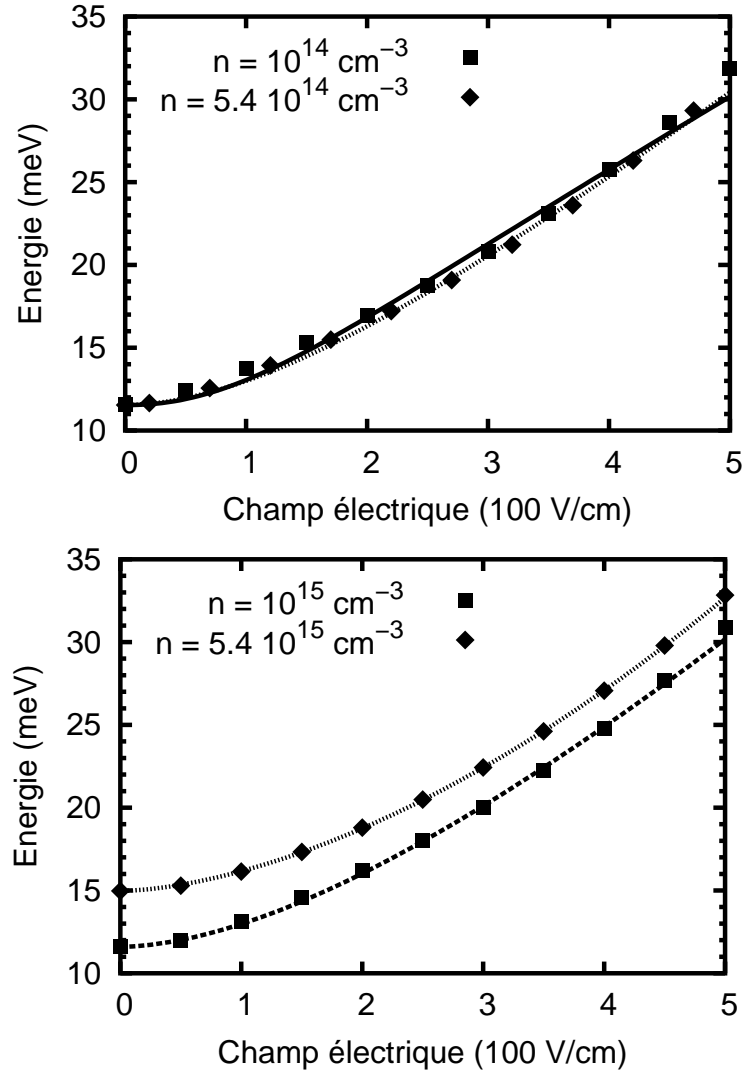


Figure 3.6 : Valeurs de l'énergie moyenne calculées par le simulateur Monte Carlo (symboles) et expressions analytiques (lignes).

3.2.3 La vitesse de dérive

Nous avons calculé la vitesse de dérive des électrons à l'aide de l'algorithme décrit dans l'annexe B et l'avons reportée en fonction du champ électrique et pour différentes densités d'électrons libres sur la figure 3.7.

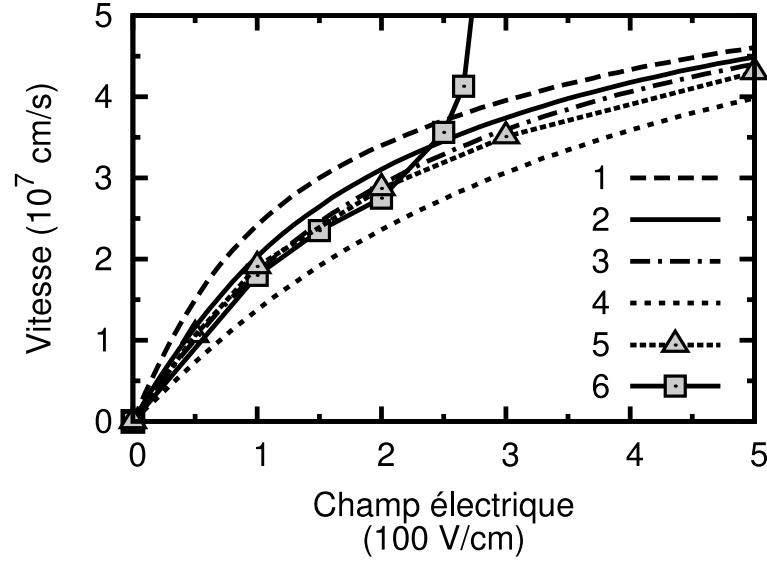


Figure 3.7 : Vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique calculée par notre simulateur Monte Carlo pour des densités électroniques $n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ (1), $n = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ (2), $n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (3) et $n = 5.4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (4). La courbe 5 est issue des travaux théoriques de Gelmont [Gelmont *et al.*, 1992b] pour $n = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. La courbe 6 est une courbe expérimentale extraite de la référence [Dornhaus *et al.*, 1976], avec $n = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

Nous voyons apparaître, ici aussi, les deux régions que nous avons décrites au paragraphe précédent lors de notre discussion sur l'énergie moyenne. À faibles champs électriques, la vitesse de dérive croît linéairement avec le champ. La probabilité d'occupation des états de hautes énergies étant d'autant plus petite que le champ électrique est faible, le nombre d'électrons en mesure d'émettre un phonon optique polaire est peu important. Les transitions électroniques sont de fait essentiellement dues aux impuretés ionisées, qui, comme nous l'avons vu dans le chapitre 1, induisent des collisions élastiques. Remarquons toutefois que, pour une valeur du champ électrique, la vitesse de dérive est d'autant plus faible que la densité d'impuretés ionisées est importante. En effet, les collisions avec les impuretés ionisées gagnent en efficacité lorsque le dopage est plus élevé et leurs effets sur la vitesse de dérive se font de fait plus importants.

Nous avons vu dans le paragraphe 3.2.1 que la probabilité d'occupation des états de hautes

énergies croît à mesure que le champ électrique augmente. De fait, le nombre d'électrons pouvant émettre un phonon optique devient plus important. Plus on rentre dans le régime de porteurs chauds, plus l'efficacité des phonons devient grande et, bien que ceux-ci ne soient plus en mesure de thermaliser les électrons, ils limitent leur vitesse moyenne. C'est ce que montre la figure 3.7, lorsque les champs électriques dépassent la cinquantaine de volts par centimètres.

Remarquons que, si pour un champ électrique de 500 V/cm l'échauffement des électrons est important, les effets des impuretés, qui dans de telles conditions auraient dû quasiment disparaître, sont toujours présents. En effet, on observe pour ce champ une vitesse de dérive plus faible pour les plus grandes densités de dopage. En fait, comme nous l'avons remarqué dans le paragraphe 3.1, les collisions avec les impuretés ionisées gardent une probabilité d'occurrence très importante lorsque les transitions dues aux phonons optiques polaires s'avèrent dominantes. Par conséquent, elles continuent à influencer les paramètres de transport électronique en agissant en particulier sur la vitesse de dérive. Toutefois, nous pouvons remarquer que, même pour les densités électroniques les plus élevées, la vitesse de dérive dans le MCT reste élevée, puisqu'elle est de l'ordre de 4×10^7 cm/s à 500 V/cm.

À titre de comparaison, nous avons tracé sur la figure 3.7 des résultats théoriques extraits de la référence [Gelmont *et al.*, 1992b] et correspondant à une densité d'électrons libres $n = 5.4 \times 10^{14}$ cm⁻³ (courbe 5). Nous pouvons observer un accord satisfaisant entre nos calculs et ces valeurs. De plus, des données expérimentales issues de la référence [Dornhaus *et al.*, 1976] ont été reportées à travers la courbe 6. Nous pouvons remarquer leur accord avec nos résultats Monte Carlo pour des champs électriques inférieurs à environ 200 V/cm. Au delà de ce champ, la courbe expérimentale croît brutalement : elle ne correspond alors plus à une vitesse de dérive mais traduit une augmentation du courant due aux effets de génération électronique.

Comme nous l'avons fait dans le cas de l'énergie moyenne, nous avons approché les courbes issues de nos calculs de la vitesse de dérive par des expressions analytiques de la forme [Ali

Omar et Reggiani, 1987; Varani *et al.*, 1995] :

$$\bar{v}(E) = v_s \frac{E/E_c}{[1 + (E/E_c)^\beta]^{1/\beta}} \quad (3.5)$$

où v_s , E_c et β sont des paramètres ajustables. Nous prenons pour E_c les mêmes valeurs que dans le cas de l'énergie moyenne. Toutefois, en ce qui concerne β , nous obtenons une meilleure interpolation des résultats Monte Carlo obtenus pour la vitesse en remplaçant les valeurs précédemment choisies par $\beta = 1$, et ce pour toutes les densités électroniques considérées. Les valeurs des deux autres paramètres en fonction de la densité électronique sont données dans le tableau 3.4. À titre de comparaison, les valeurs de la vitesse moyenne calculées par notre simulateur Monte Carlo et les courbes analytiques sont reportées sur la figure 3.8 pour les différentes densités d'électrons libres considérées.

Densité d'électrons (cm ⁻³)	v_s (cm/s)	E_c (V/cm)
10^{14}	5.90×10^7	148
5.4×10^{14}	6.46×10^7	218
10^{15}	6.79×10^7	268
5.4×10^{15}	8.00×10^7	494

Tableau 3.4 : Valeurs des paramètres utilisés pour exprimer analytiquement la vitesse de dérive.

3.2.4 La mobilité

La mobilité de corde, définie par :

$$\mu = \frac{v}{E} \quad (3.6)$$

ainsi que la mobilité différentielle, donnée par la relation :

$$\mu' = \frac{dv}{dE} \quad (3.7)$$

ont été calculées et reportées sur la figure 3.9 en fonction du champ électrique et pour différentes densités d'électrons libres. Nous pouvons observer que la mobilité de corde [fi-

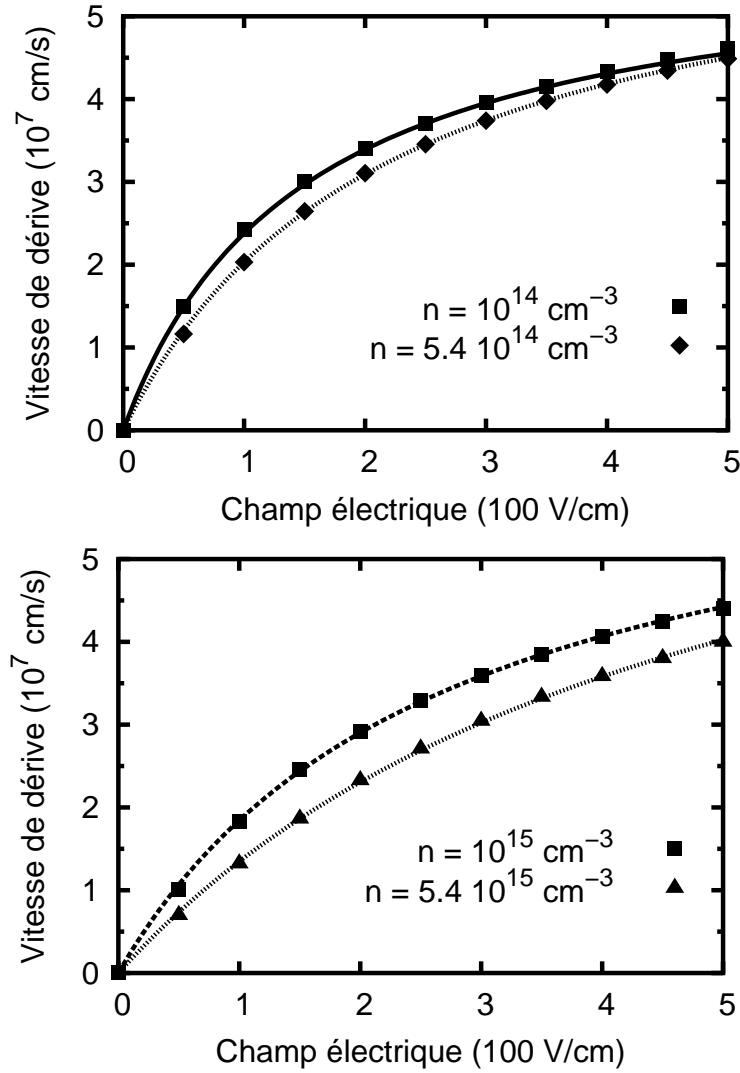


Figure 3.8 : Valeurs de la vitesse moyenne calculées par le simulateur Monte Carlo (symboles) et expressions analytiques (lignes).

gure 3.9(a)] décroît avec le champ électrique. Celle-ci est d'autant plus élevée que la densité d'impuretés ionisées est faible, ce qui traduit l'effet des impuretés sur la vitesse de dérive. La mobilité différentielle [figure 3.9(b)] décrit quant à elle la réponse de la vitesse à une variation du champ électrique. Celle-ci diminuant avec le champ électrique, on peut en conclure que le régime de porteurs chauds affecte le comportement dynamique du matériau. Pour les densités électriques considérées, la mobilité à champ nul est de l'ordre de $10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, ce qui correspond aux données expérimentales présentées dans le chapitre 1.

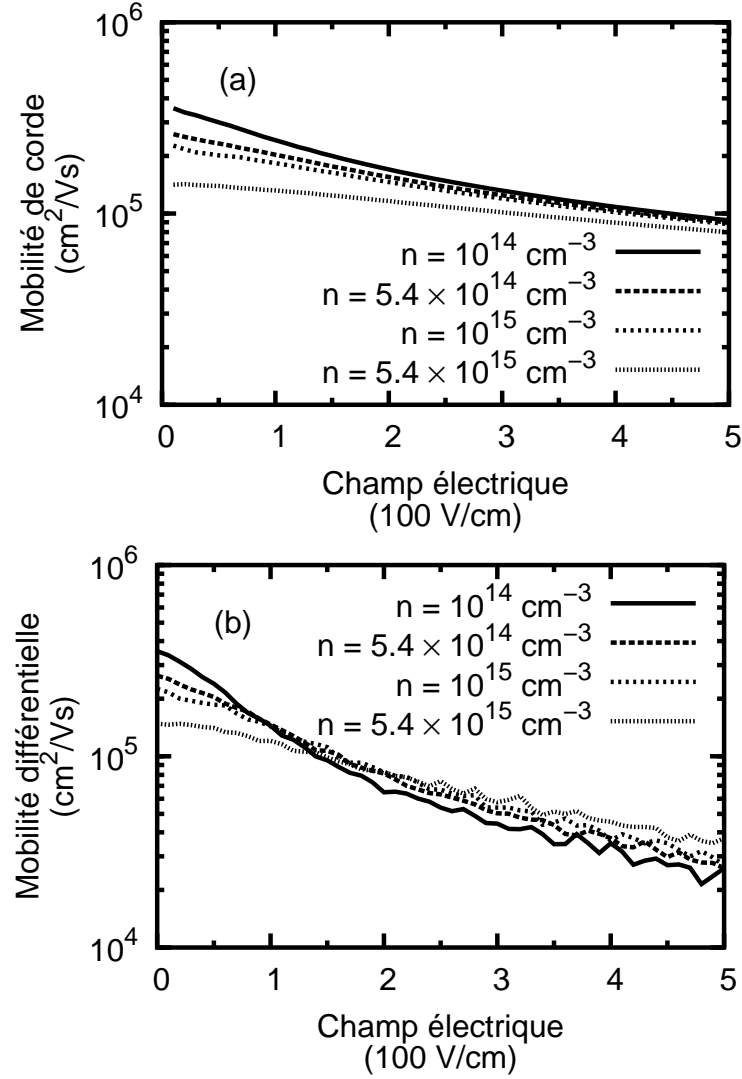


Figure 3.9 : Mobilité de corde (a.) et différentielle (b.) en fonction du champ électrique dans le MCT pour différentes densités d'électrons libres.

Nous avons approché la mobilité de corde et la mobilité différentielle à partir de l'expression 3.5, donnée pour la vitesse, par la relation :

$$\mu(E) = \frac{v}{E} = \frac{v_s}{E + E_c} \quad (3.8)$$

pour la mobilité de corde, et par :

$$\mu'(E) = \frac{dv}{dE} = v_s \frac{1/E_c}{(1 + E/E_c)^2} \quad (3.9)$$

pour la mobilité différentielle. Les valeurs v_s et E_c sont les mêmes que celles utilisées pour la vitesse et reportées dans le tableau 3.4.

Nous avons comparé dans les figures 3.10 et 3.11 les valeurs calculées par le simulateur Monte Carlo et les expressions analytiques pour la mobilité de corde et la mobilité différentielle.

Enfin, les valeurs de la mobilité ohmique calculées par notre simulateur Monte Carlo ont été reportées sur la figure 3.12. Celle-ci montre un bon accord de nos résultats avec différentes données extraites de la littérature.

3.2.5 La masse effective moyenne

La masse effective dans la direction du champ électrique m^* est, comme nous l'avons vu au chapitre 2, l'un des paramètres d'entrée du modèle hydrodynamique. Nous avons calculé celle-ci en fonction du champ électrique pour différentes densités d'électrons libres. Nous avons utilisé pour ce faire l'algorithme décrit dans l'annexe B. Les résultats ont été reportés dans la figure 3.13 sous forme de symboles et ont été approchés par les courbes analytiques, reportées en traits pleins, exprimées par le trinôme de second degré :

$$m^*(E) = a E^2 + b E + c \quad (3.10)$$

Les valeurs de a , b et c sont données en fonction de la densité électronique dans le tableau 3.5.

Nous pouvons remarquer que la masse effective croît continûment avec le champ électrique, et ce quelle que soit la densité électronique. Dans le domaine de champs considéré, la masse effective double sa valeur. En effet, plus le champ électrique est important, plus les électrons atteignent des états d'énergies élevées. Or, la forte non-parabolicité affecte la bande

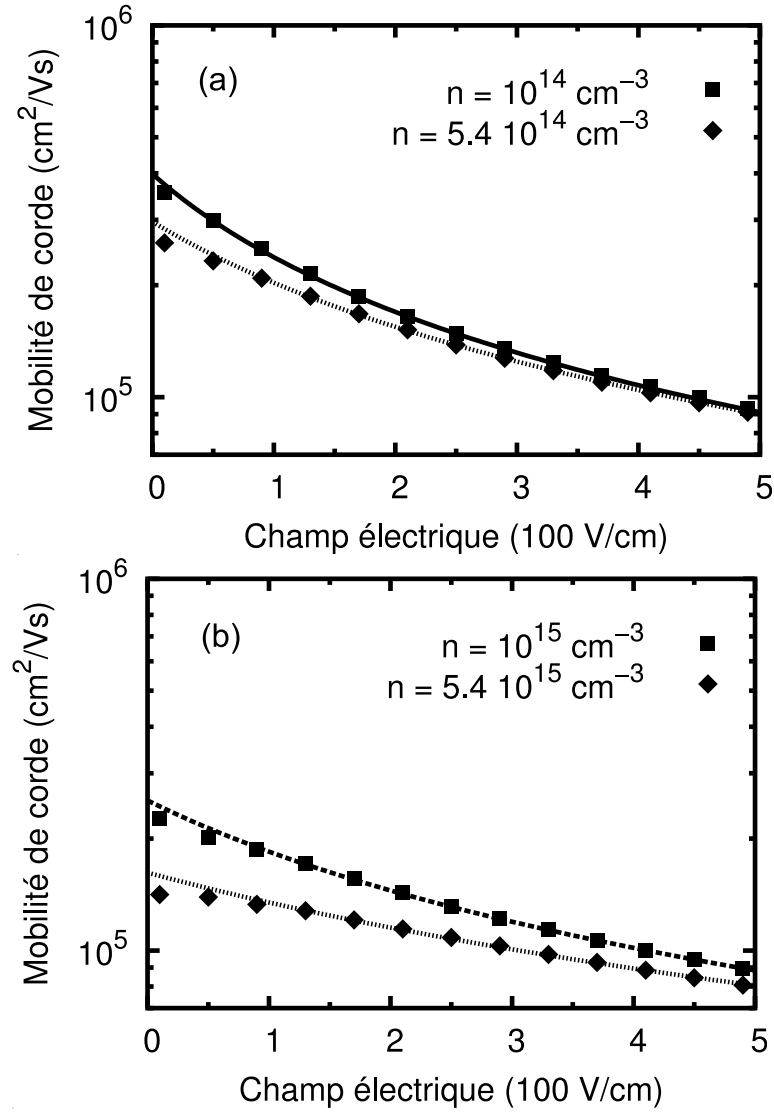


Figure 3.10 : Valeurs de la mobilité de corde calculée par le simulateur Monte Carlo (symboles) et courbes correspondant aux expressions analytiques (lignes).

Densité d'électrons (cm^{-3})	a ($10^{-42} \text{ kg m}^2 \text{ V}^{-2}$)	b ($10^{-38} \text{ kg m V}^{-1}$)	c (10^{-32} kg)
10^{14}	2.72	9.231	0.953
5.4×10^{14}	3.615	3.976	0.968
10^{15}	3.08	5.706	0.945
5.4×10^{15}	3.15	3.637	1.036

Tableau 3.5 : Valeurs des paramètres utilisés pour exprimer analytiquement la masse effective moyenne.

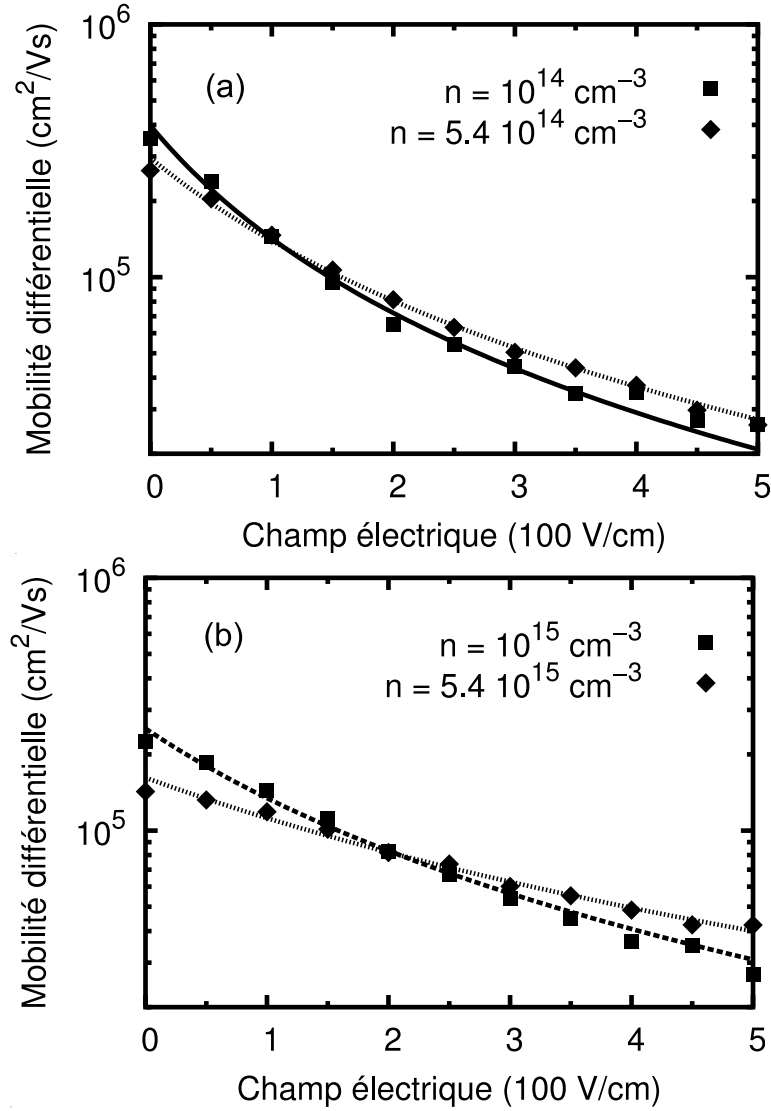


Figure 3.11 : Valeurs de la mobilité différentielle calculée par le simulateur Monte Carlo (symboles) et courbes correspondant aux expressions analytiques (lignes).

de conduction de sorte que la courbure de celle-ci, qui représente l'inverse de la masse efficace, est d'autant plus faible que l'énergie électronique est grande. Soulignons de plus que pour $n = 5.4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, du fait de la dégénérescence et de l'augmentation d'énergie électronique qui en découle, la masse effective moyenne à champ nul est plus grande que pour les autres densités électroniques considérées.

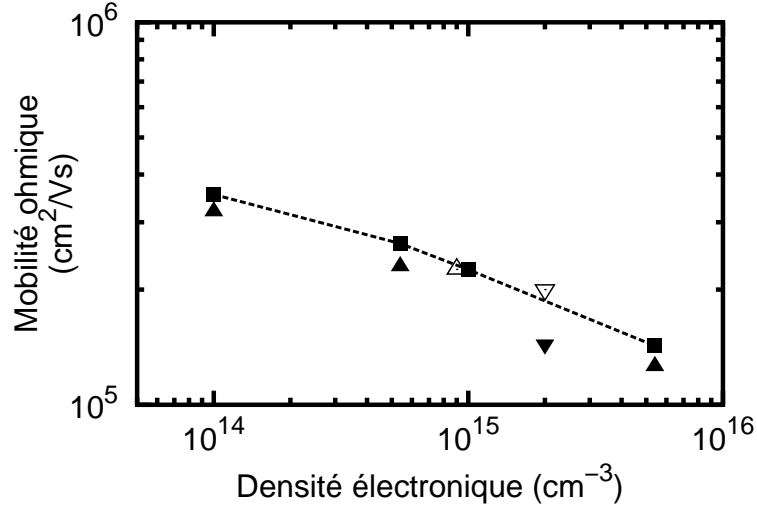


Figure 3.12 : Mobilité ohmique en fonction de la densité électronique calculée par notre simulateur Monte Carlo (■), et extraits des références [Gelmont *et al.*, 1992b] (▲ et ▽), [Scott, 1971] (▼) et [Nimtz *et al.*, 1974] (△)

3.2.6 Taux de relaxation de la vitesse et de l'énergie

Nous avons vu, dans la section 2.4 (page 84), que l'utilisation de l'approche hydrodynamique est indispensable si l'on veut pouvoir décrire l'évolution dans le temps de la densité de porteurs et évaluer correctement le comportement électronique du matériau. Pour l'application d'un tel modèle macroscopique, la connaissance des temps de relaxation de la vitesse et de l'énergie est nécessaire. Pour l'heure, nous avons extrait l'ensemble des grandeurs stationnaires nécessaires à la résolution des équations (2.102) et (2.103) (page 85), et par là même à la mise en place d'un simulateur de ce type.

Nous avons reporté sur la figure 3.14 les taux de relaxation de la vitesse ν_v et de l'énergie ν_ϵ , définis par

$$\nu_v = 1/\tau_v \quad (3.11)$$

et

$$\nu_\epsilon = 1/\tau_\epsilon \quad (3.12)$$

et où τ_v et τ_ϵ vérifient respectivement les relations (2.55) et (2.56) (page 65).

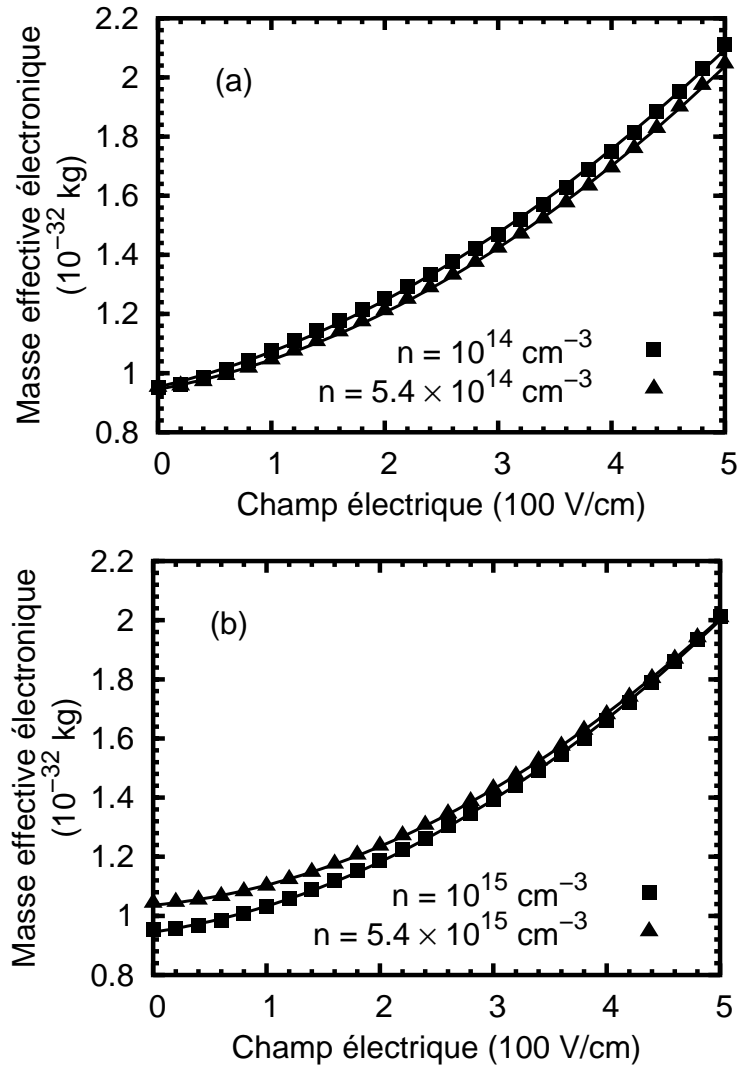


Figure 3.13 : Masse effective électronique moyenne dans la direction du champ en fonction du champ électrique et pour différentes densités d'électrons libres.

Nous pouvons remarquer que le taux de relaxation de l'énergie croît en fonction du champ électrique sur la plage de valeurs considérées. En effet, à mesure que le champ électrique augmente, le nombre de collisions inélastiques avec les phonons optiques polaires augmente aussi et, par conséquent, les processus de relaxation de l'énergie se font de plus en plus nombreux. Le taux de relaxation de la vitesse varie pour sa part moins que celui de l'énergie. Il augmente avec le champ électrique jusqu'à environ 300 V/cm du fait de l'efficacité croissante des collisions optiques qui permettent une relaxation plus rapide de la vitesse. Puis, pour des

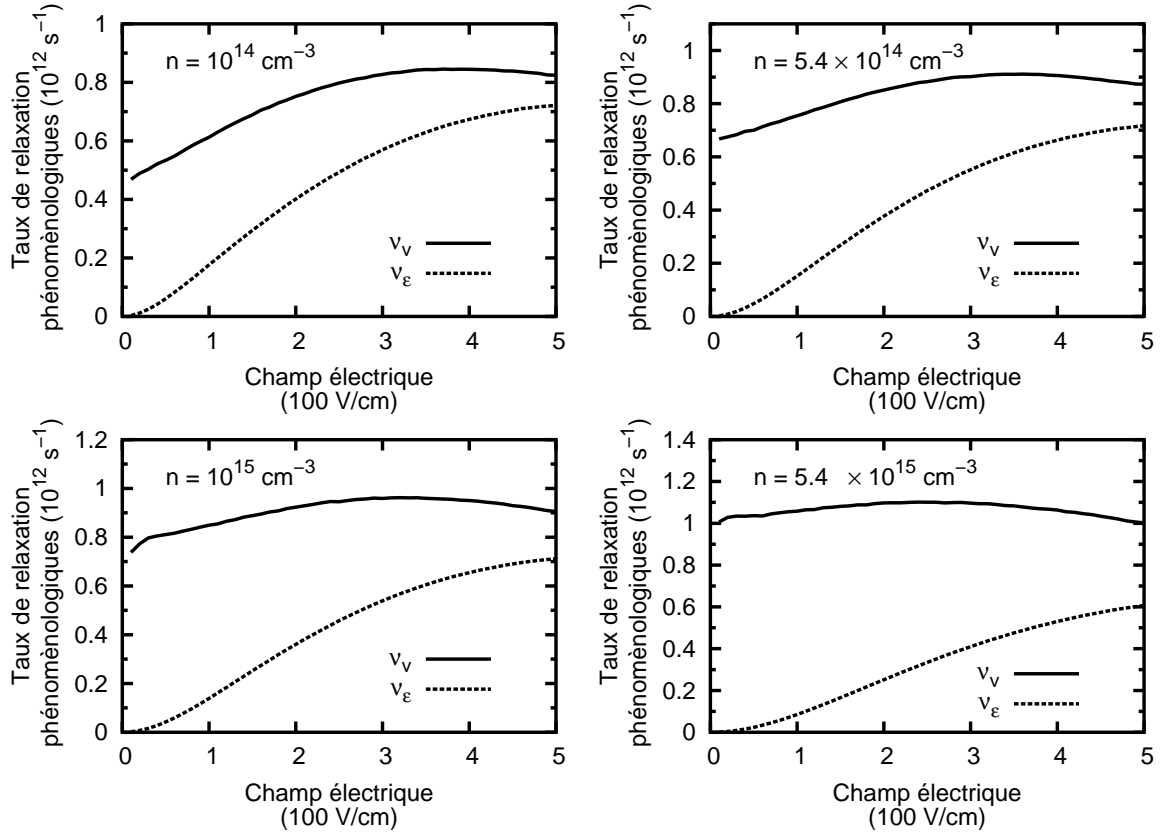


Figure 3.14 : Taux de relaxation en fonction du champ électrique pour les différentes densités électroniques considérées.

champs plus élevés, il décroît légèrement sous l'effet de la saturation de la vitesse de dérive et de l'augmentation de la masse effective moyenne : les électrons, plus lourds aux forts champs électriques, relaxent leurs vitesses moins rapidement. Quoi qu'il en soit, pour chaque densité électronique considérée, le taux de relaxation de la vitesse est, pour un champ donné, supérieur à celui de l'énergie. Cela implique une relaxation plus rapide pour la vitesse électronique que pour l'énergie.

3.2.7 Grandeurs transitoires

Nous avons calculé, à l'aide des simulateurs Monte Carlo et hydrodynamique, la vitesse et l'énergie électronique en fonction du temps. Pour ce faire, à l'instant $t = 0$, nous avons appliqué sur le système se trouvant à l'équilibre thermodynamique un échelon de champ

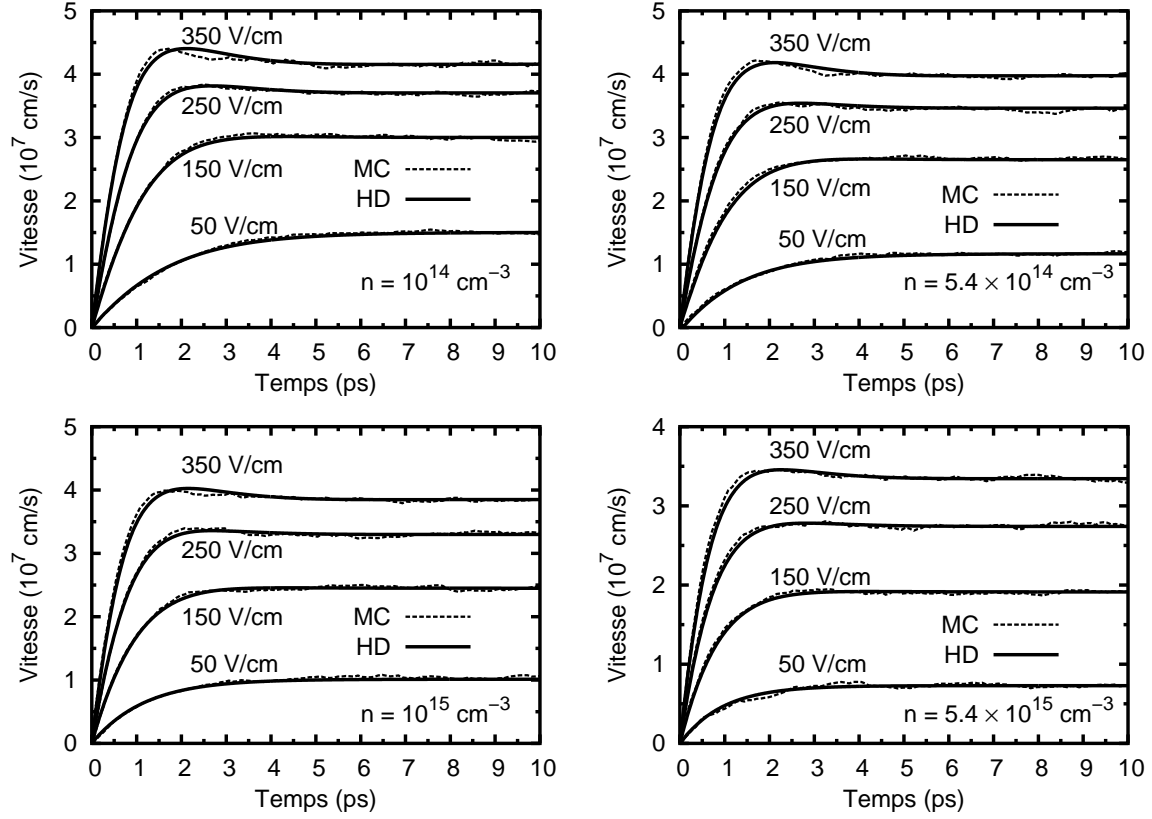


Figure 3.15 : Vitesse électronique en fonction du temps calculée par la méthode de Monte Carlo (MC) et par le modèle hydrodynamique (HD) pour les différentes densités électroniques considérées.

électrique. Les résultats sont reportés pour différentes valeurs du champ électrique et de la densité électronique sur la figure 3.15 en ce qui concerne la vitesse, et sur la figure 3.16 en ce qui concerne l'énergie. Les courbes hydrodynamiques (HD) sont données en lignes pointillées et les résultats Monte Carlo (MC) en traits pleins. Nous pouvons remarquer que la vitesse et l'énergie décrivent toutes deux un régime transitoire de quelques picosecondes avant d'atteindre une valeur stationnaire. Lorsque le champ est suffisamment élevé, et c'est le cas à 350 V/cm dans le MCT, la relaxation énergétique intervient après que les électrons aient pu atteindre des valeurs de la vitesse supérieures à sa valeur stationnaire, et l'on voit apparaître pendant le transitoire un léger effet de survitesse.

Soulignons que, dans le cas de la vitesse comme dans celui de l'énergie électronique, nous

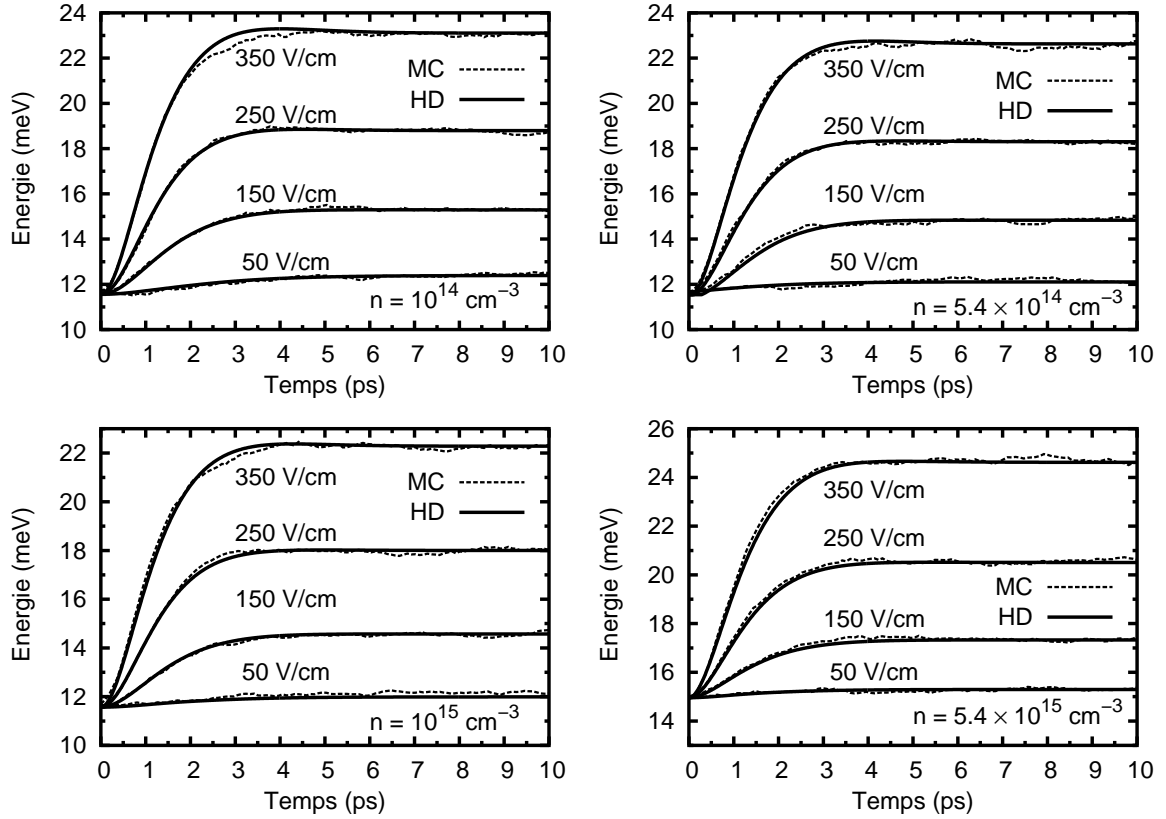


Figure 3.16 : Énergie électronique en fonction du temps calculée par la méthode de Monte Carlo (MC) et par le modèle hydrodynamique (HD) pour les différentes densités électroniques considérées.

observons un excellent accord entre les résultats du modèle hydrodynamique et ceux de la méthode Monte Carlo, ce qui valide le simulateur hydrodynamique.

3.3 Évolution de la densité de porteurs

Afin de comparer les résultats que nous avons obtenus pour la vitesse de dérive avec la courbe expérimentale reportée sur la figure 1.19 et extraite de la référence [Dornhaus *et al.*, 1976], les densités de courant normalisées ont été reportées sur la figure 3.17. Dans le cas expérimental comme dans le cas théorique, les dopages considérés sont $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Celle-ci montre un bon accord entre nos résultats et les résultats expérimentaux jusqu'à des champs électriques d'environ 200 V/cm. Au delà, la courbe expérimentale se met à augmenter

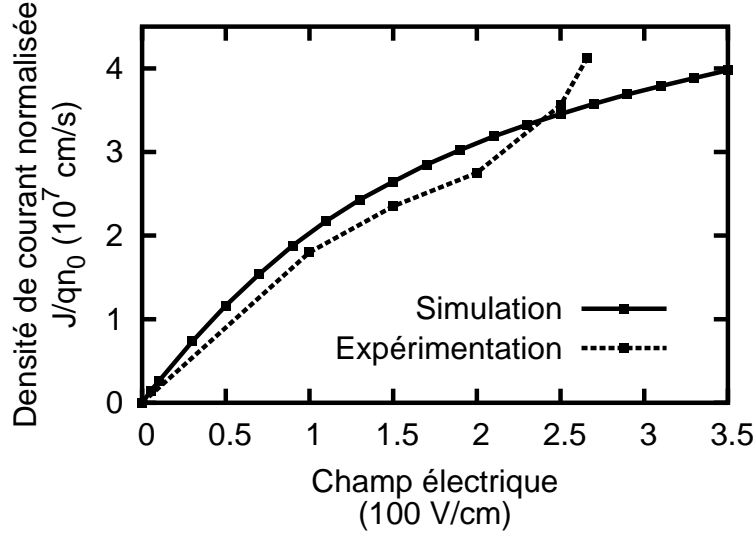


Figure 3.17 : Densité de courant normalisée J/qn_0 en fonction du champ électrique obtenue par la simulation et l'expérimentation, avec $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

brutalement, ce qui peut être attribué à l'augmentation de la densité électronique attendant à la mise en place des processus de génération-recombinaison.

L'étape suivante nécessaire à la description du comportement électronique du MCT est par conséquent l'étude de l'évolution de la densité électronique avec le champ électrique. Nous ajoutons donc au modèle hydrodynamique utilisé dans le paragraphe précédent, et dont nous avons montré la fiabilité, la description de l'évolution temporelle de la densité électronique. Nous introduisons dans ce but l'équation (2.101) (page 85) qui décrit la balance dans le temps des processus de génération et de recombinaison Auger. Rappelons que, comme il a été dit dans la section 2.4 (page 84), nous devons déterminer les valeurs adéquates des variables R et g avant de pouvoir résoudre cette équation. Si le taux de recombinaison R peut être extrait de la littérature et pris égal à $R = 10^{-24} \text{ cm}^6 \text{ s}^{-1}$ [Dmitriev et Mocker, 1995], le taux de génération g doit quant à lui être calculé à l'aide du simulateur Monte Carlo. À cet effet, nous avons introduit le phénomène d'ionisation par impact à travers une probabilité de collision ionisante donnée par la relation (2.104) (page 85). Dans cette expression, les grandeurs P_{ii} et ψ ne sont pas explicitées et doivent, avant toute chose, être déterminées.

3.3.1 Détermination préalable des paramètres P_{ii} et ψ

Afin de déterminer les valeurs des grandeurs P_{ii} et ψ de la relation (2.104) (page 85), nous avons cherché à nous rapprocher le plus possible des données expérimentales dont nous disposons. À ce titre, nous avons comparé les résultats expérimentaux extraits de la référence [Nimtz *et al.*, 1974], et reportés précédemment sur la courbe 1.21 (page 46), avec des simulations Monte Carlo effectuées pour différentes valeurs de ces deux paramètres. Nous avons pris une densité électronique $n = 6 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et avons normalisé les résultats de nos calculs afin que la résistance ohmique soit la même dans nos simulations et sur la courbe expérimentale.

Parmi les différentes possibilités envisagées, la figure 3.18 montre que le choix de $P_{ii} = 10^{12} \text{ s}^{-1}$ et de $\psi = 3$ (courbe 3) mène à un bon accord entre les calculs théoriques et les données expérimentales (courbe 1). Le taux de collisions correspondant à ces valeurs a été calculé à travers la relation 2.104 (page 85). C'est celui-là même que nous avons précédemment reporté sur la figure 3.1 (page 90).

Les résultats obtenus pour une densité électronique $n = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ sont reportés sur la figure 3.19. Nous pouvons observer un accord satisfaisant entre les données expérimentales et nos calculs, ce qui valide notre choix concernant les deux paramètres P_{ii} et ψ .

3.3.2 Détermination du taux de génération g

D'après la relation (1.37) (page 45), sous l'effet de la génération électronique, la densité d'électrons doit suivre une évolution dans le temps de la forme :

$$\frac{n(t)}{n_0} = \exp(gt) \quad (3.13)$$

où n_0 est la densité d'électrons libres à champ nul.

Nous avons déterminé, à l'aide de notre simulateur Monte Carlo, l'évolution dans le temps de la densité électronique n . Les résultats obtenus pour $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et pour diffé-

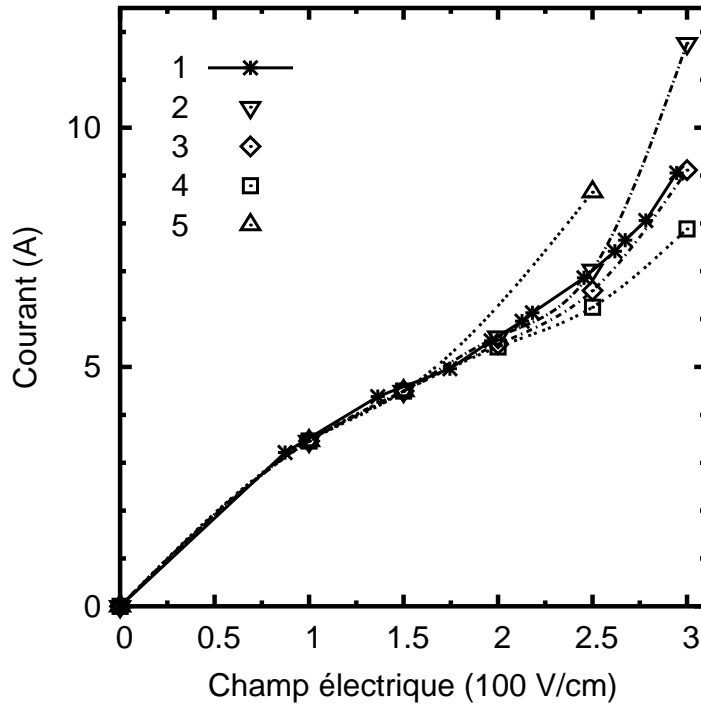


Figure 3.18 : Courant en fonction du champ électrique mesuré expérimentalement [Nimtz *et al.*, 1974] (1) et simulé à l'aide du simulateur Monte Carlo pour $P_{ii} = 5 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ et $\psi = 2$ (2), pour $P_{ii} = 10^{12} \text{ s}^{-1}$ et $\psi = 3$ (3), pour $P_{ii} = 5 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ et $\psi = 3$ (4) et pour $P_{ii} = 10^{12} \text{ s}^{-1}$ et $\psi = 2$ (5).

rentes valeurs du champ électrique sont reportés, sous forme de symboles, dans la figure 3.20. Nous pouvons remarquer que la densité électronique subit bien l'évolution temporelle décrite par la relation (3.13). Par analogie (voir les courbes reportées sur la figure 3.20), nous avons déterminé la valeur du taux de génération électronique g pour les différentes densités d'électrons considérées et en fonction du champ électrique. Remarquons que, du fait de la faible influence des effets de la dégénérescence sur la fonction de distribution autour de l'énergie de seuil ϵ_{th} [voir figure 3.2(b), page 92], celle-ci n'a pas été prise en compte dans les calculs. Les résultats obtenus sont donnés dans le tableau 3.6 et reportés sous forme de symboles dans la figure 3.21. Nous pouvons remarquer que, pour l'ensemble des densités électroniques considérées, le taux d'ionisation croît avec le champ électrique. En effet, à mesure que le champ électrique augmente, le nombre d'électrons en mesure d'atteindre l'énergie nécessaire

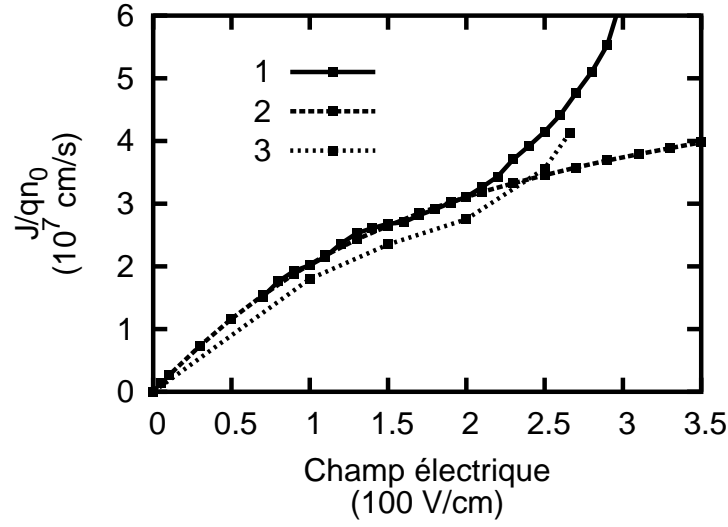


Figure 3.19 : Densité de courant normalisée en fonction du champ électrique. Les courbes (1) et (2) représentent respectivement les simulations avec et sans ionisation par impact. La courbe avec ionisation par impact a été calculée pour un temps $t = 50$ ns. La courbe (3) est une courbe expérimentale extraite de la référence [Dornhaus *et al.*, 1976].

à l'ionisation par impact du réseau cristallin devient plus important.

Par la suite, les différentes valeurs de g en fonction du champ électrique ont été approchées à travers la formule théorique de Shockley, donnée par [Dmitriev et Mocker, 1995] :

$$g = g_0 \times \exp(E/E_0) \quad (3.14)$$

où les grandeurs g_0 et E_0 sont des paramètres ajustables, dépendant de la densité électronique à champ nul n_0 et donnés dans le tableau 3.7. À titre de comparaison, les courbes analytiques de Shockley ont été reportées avec les paramètres adéquats dans la figure 3.21.

Nous pouvons remarquer que le taux de génération, bien qu'il varie peu en fonction du dopage, diminue légèrement avec la densité électronique. En l'absence de dégénérescence, cela peut être attribué à l'efficacité croissante des collisions avec les impuretés ionisées qui limitent le nombre d'électrons en mesure d'ioniser le réseau.

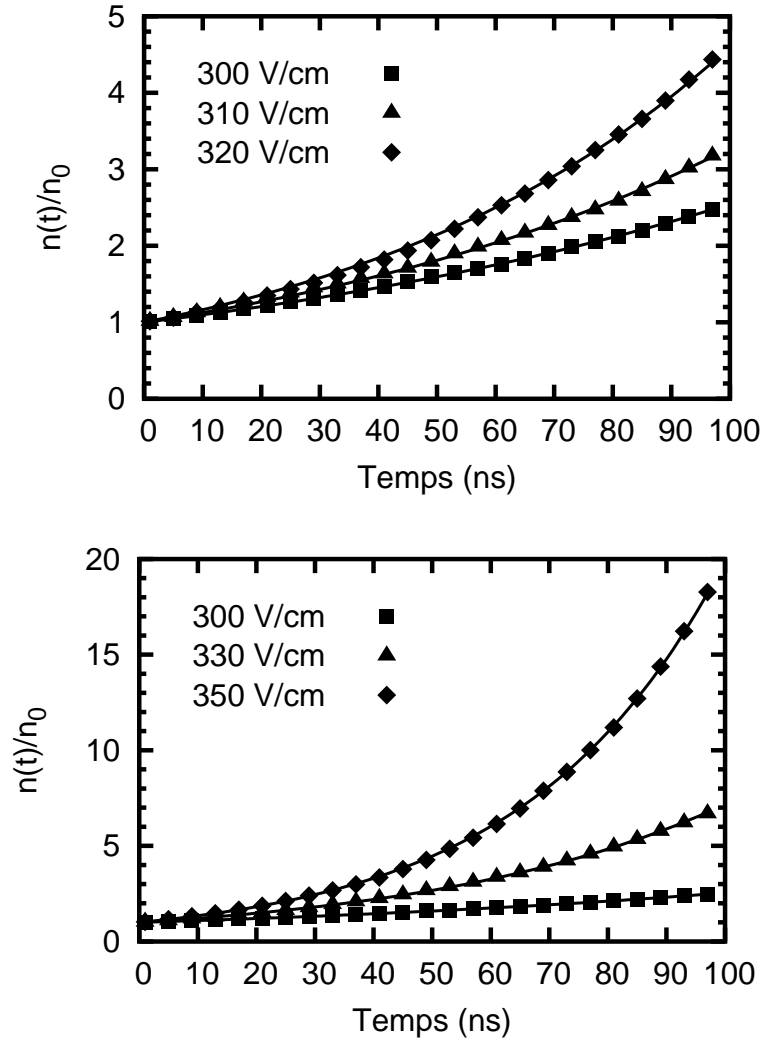


Figure 3.20 : Évolution de la densité électronique normalisée à la densité initiale n_0 pour différentes valeurs du champ électrique. Les symboles correspondent aux calculs Monte Carlo et les courbes à l'expression analytique 3.13.

3.3.3 Résolution de l'équation balance

La connaissance des paramètres g et R nous permet de résoudre l'équation de balance des processus de génération et de recombinaison Auger (2.101) (page 85) et, par conséquent, de décrire l'évolution temporelle de la densité électronique. Nous avons représenté sur la figure 3.22 l'évolution dans le temps de la densité électronique normalisée $n(t)/n_0$ pour différentes valeurs du champ électrique et pour $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Celle-ci présente un régime

Champ électrique (V/cm)	Coefficient d'ionisation g (10^7 s^{-1})			
	$n_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$	$5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$	10^{15} cm^{-3}	$5.4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$
200	0.103	0.076	0.0930	0.0620
210	0.112	0.103	0.0970	0.0730
220	0.137	0.130	0.123	0.0950
230	0.196	0.172	0.169	0.115
240	0.239	0.205	0.198	0.170
250	0.328	0.298	0.248	0.207
260	0.405	0.354	0.337	0.273
270	0.521	0.478	0.439	0.309
280	0.682	0.560	0.539	0.383
290	0.805	0.750	0.681	0.478
300	1.03	0.934	0.932	0.619
310	1.34	1.19	1.12	0.796
320	1.64	1.53	1.37	1.01
330	2.03	1.97	1.72	1.27
340	2.61	2.38	2.23	1.61
350	3.27	2.99	2.77	2.02

Tableau 3.6 : Tableau des valeurs de g obtenues par la simulation Monte Carlo.

Densité électronique n_0 (cm^{-3})	g_0 (s^{-1})	E_0 (V/cm)
10^{14}	10000	43.2
5.4×10^{14}	8400	42.9
10^{15}	7900	42.8
5.4×10^{15}	5600	42.7

Tableau 3.7 : Tableau des valeurs de g_0 et de E_0 obtenues par la simulation Monte Carlo.

transitoire de plusieurs centaines de nanosecondes avant de prendre une valeur stationnaire, atteinte lorsque les processus de recombinaison équilibrent les effets de la génération électronique. Nous pouvons remarquer que plus le champ électrique est élevé, plus la durée du

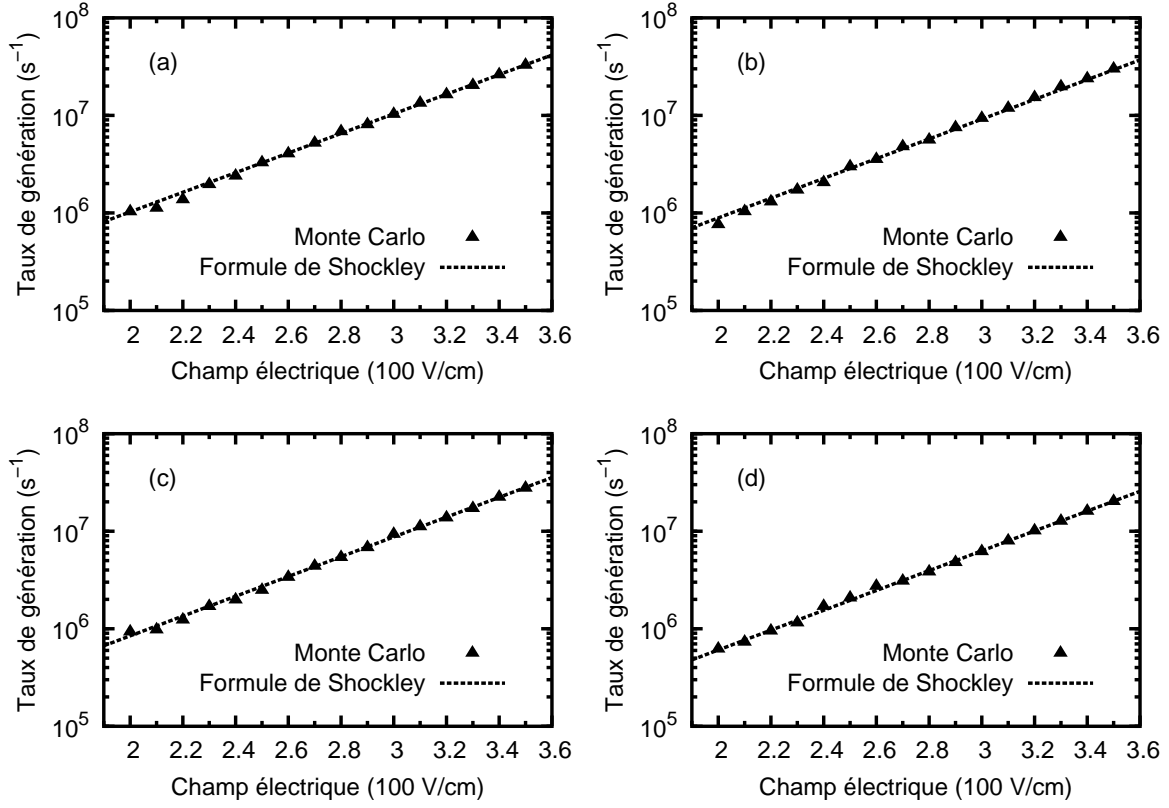


Figure 3.21 : Valeurs de g calculées à l'aide de notre simulateur Monte Carlo (symboles) pour $n_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ (a), $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ (b), $n_0 = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (c) et pour $n_0 = 5.4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (d). Les courbes en pointillés correspondent à l'expression théorique de Shockley, reportée avec les paramètres adéquats (voir tableau 3.7).

transitoire est courte et plus la densité électronique atteinte en régime stationnaire est importante. En effet, lorsque le champ électronique est plus élevé, les électrons ont une capacité d'ionisation plus grande et, de fait, le coefficient g prend des valeurs plus importantes. La densité électronique augmente par conséquent plus vite et atteint plus rapidement des valeurs plus élevées. En même temps, du fait de cette croissance rapide, les processus de recombinaison, d'autant plus nombreux que la densité d'électrons libres est importante, sont en mesure de compenser la génération électronique plus tôt.

Les courbes de la figure 3.23 permettent d'évaluer l'influence de la recombinaison Auger sur la densité électronique. En effet, elles décrivent l'évolution temporelle de la densité d'électrons

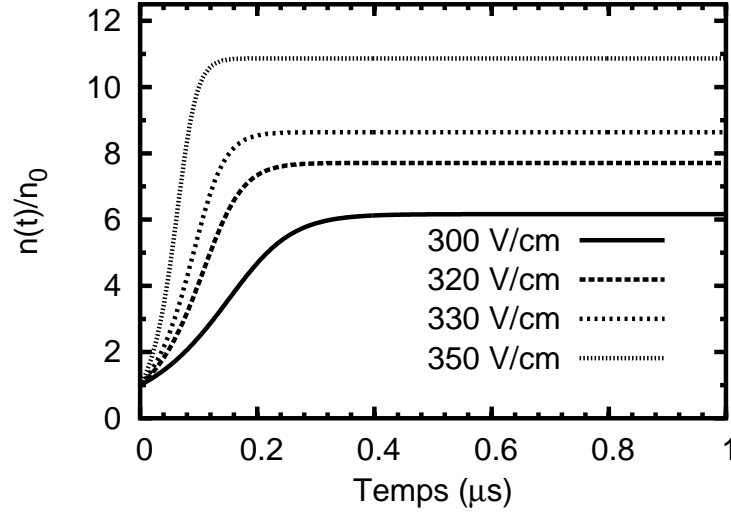


Figure 3.22 : Évolution dans le temps de la densité électronique normalisée pour $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et pour différentes valeurs du champ électrique.

libres lorsque la recombinaison électronique est prise en compte et lorsque celle-ci est négligée. Nous avons ici aussi considéré une densité électronique à champ nul $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Nous pouvons remarquer qu'en dessous de 50 ns, les effets de la recombinaison sont négligeables pour la densité considérée. En effet, pour de telles durées de temps, la densité électronique ne peut atteindre des valeurs assez élevées pour que le nombre de processus de recombinaison Auger, proportionnel à $n^2 p$ d'après la relation (1.33) (page 42), soit suffisamment important.

Nous avons reporté sur la figure 3.24 la densité électronique stationnaire n_s en fonction du champ électrique pour différents dopages. Nous vérifions comme nous l'avons vu précédemment que, pour n_0 donnée, la densité stationnaire n_s est d'autant plus importante que le champ électrique est élevé. De plus, pour un champ électrique donné, le rapport de densités n_s/n_0 est d'autant plus grand que n_0 est faible. En effet, les processus de recombinaison, dont le nombre croît avec la densité électronique, sont en mesure de compenser la génération électronique plus rapidement lorsque les densités électroniques à champ nul sont plus élevées. Par contre, lorsque n_0 est faible, il faut attendre que la densité électronique n ait atteint une valeurs suffisamment élevée pour que les effets de l'ionisation par impact soit compensés et

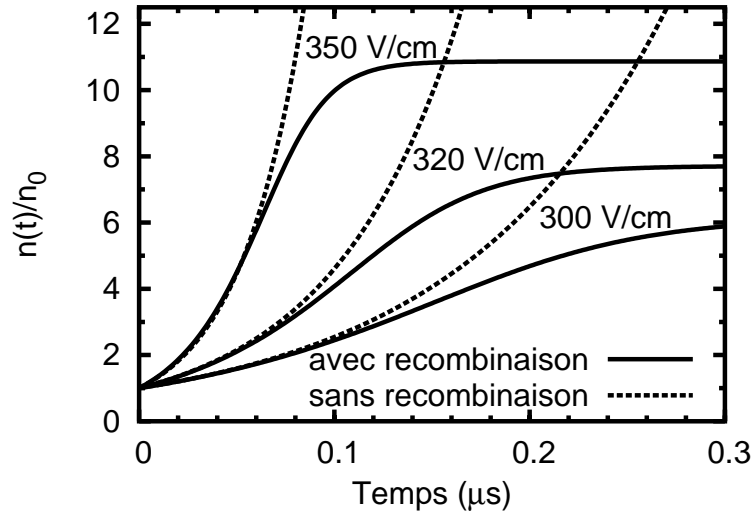


Figure 3.23 : Évolution dans le temps de la densité électronique normalisée avec et sans recombinaison électronique pour $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et pour différentes valeurs du champ électrique.

que le régime stationnaire soit atteint. Nous pouvons d'ailleurs remarquer que, pour la plus grande valeur de n_0 considérée, la multiplication électronique reste faible sur l'ensemble des champs électriques considérés. En effet, elle est dans ce cas comprise entre 1 et 2 alors qu'elle varie entre 1 et 40 pour $n_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

Remarquons enfin que les processus de génération-recombinaison influencent la densité électronique pour des champs électriques de l'ordre de 100 V/cm pour des dopages usuels, c'est à dire voisins de $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

À partir de l'évolution temporelle de la vitesse et de la densité des électrons, nous avons calculé la réponse de la densité de courant électronique J à un échelon de champ électrique à partir de la relation :

$$J(t) = q n(t) v(t) \quad (3.15)$$

Les résultats obtenus pour différentes valeurs du champ électrique et pour $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ sont reportés sur la figure 3.25. Nous pouvons observer deux temps caractéristiques. Le premier est de l'ordre de la picoseconde et marque une augmentation de la densité de courant

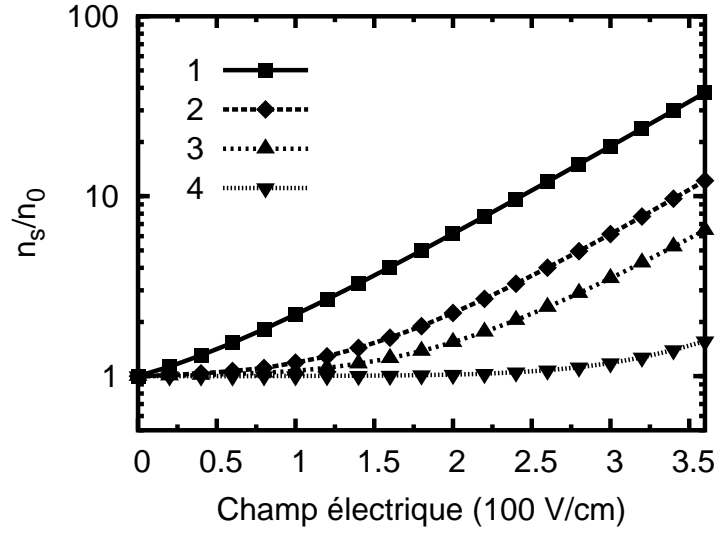


Figure 3.24 : Densité d'électrons libres normalisée en régime stationnaire en fonction du champ électrique pour $n_0 = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ (1), $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ (2), $n_0 = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (3) et $n_0 = 5.4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (4).

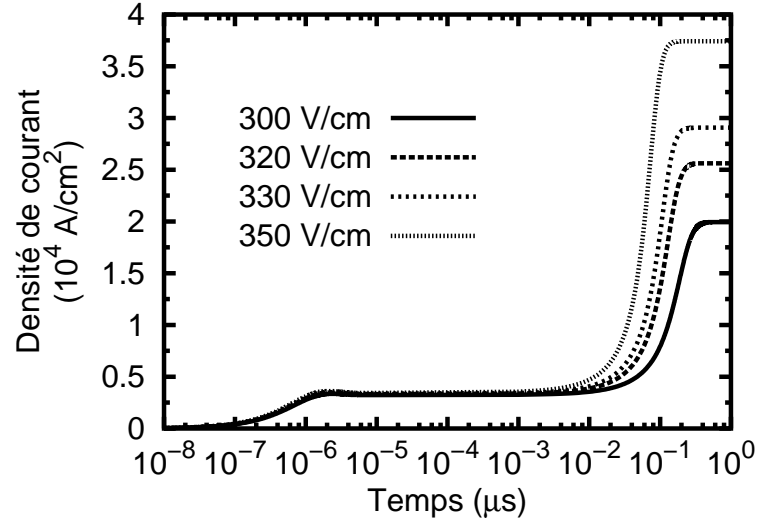


Figure 3.25 : Évolution dans le temps de la densité de courant électronique pour $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et pour différentes valeurs du champ électrique.

avant que celle-ci atteigne un premier plateau. La génération-recombinaison n'a à ce moment là que des effets négligeables et ce que l'on observe est la réponse de la vitesse. Pour les champs les plus élevés, l'effet de survitesse se manifeste par des valeurs de la densité de courant très

légèrement supérieures à celles du plateau. Autour de $0.1 \mu s$, la densité de courant présente une seconde augmentation, qui cette fois est due à l'ionisation par impact, avant d'atteindre une valeur stationnaire, du fait de l'équilibre des processus de génération et de recombinaison. À eux seuls, les processus Auger multiplient la densité de courant par un rapport n_s/n_0 entre le premier plateau et le régime stationnaire.

Chaque processus d'ionisation par impact créant une paire électron-trou, nous avons calculé et reporté sur la figure 3.26 l'évolution de la densité de trous en fonction du champ électrique pour $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Nous pouvons remarquer que, lorsque la densité élec-

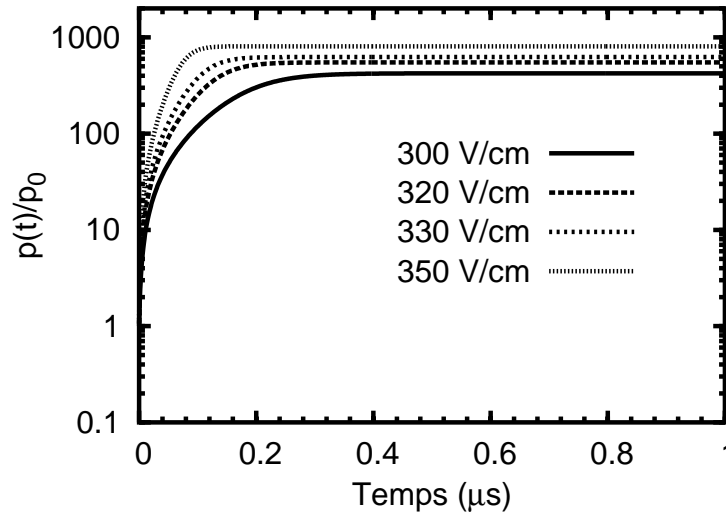


Figure 3.26 : Évolution dans le temps de la densité de trous normalisée pour $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et pour différentes valeurs du champ électrique.

tronique est décuplée, la densité de trous est multipliée par un facteur 100 à 1000. En effet, dans un matériau de type n , la densité de trous à champ nul p_0 est très petite devant n_0 . Or,

$$\Delta p = \Delta n \quad (3.16)$$

et, par conséquent :

$$\frac{\Delta p}{p_0} \gg \frac{\Delta n}{n_0} \quad (3.17)$$

3.4 Etude du bruit

Dans les semiconducteurs à applications optoélectroniques, l'étude du bruit et de ses causes possibles est importante puisqu'il ne faut pas que le signal photo-généré se trouve noyé dans les fluctuations aléatoires du courant. En même temps, s'il peut avoir des conséquences néfastes sur les performances des semiconducteurs, le bruit permet d'obtenir des informations sur le matériau auxquelles une étude au premier ordre ne donne pas accès. En particulier, il permet l'extraction du coefficient de diffusion, paramètre extrêmement important dans le domaine de la simulation.

Le coefficient de diffusion est un paramètre de transport très difficile à mesurer expérimentalement. Pour l'heure, à notre connaissance, aucun résultat, qu'il soit théorique ou expérimental, décrivant le comportement du coefficient de diffusion en fonction du champ électrique dans le MCT n'est disponible dans la littérature. De plus, comme nous l'avons vu dans le chapitre 2, c'est un paramètre indispensable à qui désire faire une simulation de type dérive-diffusion. C'est pourquoi l'extraction du coefficient de diffusion D est une étape importante que nous nous proposons de faire à l'aide de la simulation.

En régime ohmique, il est relié à la mobilité μ par la relation d'Einstein :

$$D_{\text{ohmique}} = \frac{k_B T}{e} \mu_{\text{ohmique}} \quad (3.18)$$

Lorsque l'on s'éloigne du régime ohmique, la relation précédente n'est plus valable. En effet, la température T doit être remplacée par la température de bruit T_N de sorte que le coefficient de diffusion et la mobilité différentielle μ' sont reliés, quel que soit le champ électrique, par la relation d'Einstein généralisée [Nougier, 1991] :

$$D(E) = \frac{k_B T_N(E)}{e} \mu'(E) \quad (3.19)$$

Le coefficient de diffusion est par conséquent lié au bruit dans le matériau semiconducteur. Expérimentalement, il peut être extrait à partir de la mesure de la température de bruit T_N

et de la caractéristique $I(V)$.

3.4.1 Fonction d'autocorrélation et densité spectrale de bruit de diffusion

Dans le cadre d'une approche Monte Carlo, le bruit est simulé de façon naturelle en ce sens qu'il ne nécessite pas l'utilisation de méthodes annexes telles que celle du champ d'impédance, utilisée dans les modèles macroscopiques [Shockley *et al.*, 1966]. Il suffit pour cela d'observer les fluctuations $\delta v(t)$ de la vitesse de l'un des électrons simulés en régime stationnaire, avec

$$\delta v(t) = v(t) - \bar{v} \quad (3.20)$$

où \bar{v} est la vitesse de dérive, présentée précédemment.

D'après le théorème de Wiener-Khintchine, la densité spectrale des fluctuations de la vitesse électronique, c'est à dire du bruit de diffusion, est donnée par la relation [McQuarrie, 1976; Varani et Reggiani, 1994] :

$$S_{\delta v}(f) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i 2\pi f \tau) C_{\delta v}(\tau) d\tau \quad (3.21)$$

où $C_{\delta v}(\tau)$ est la fonction d'autocorrélation des fluctuation de la vitesse électronique, vérifiant :

$$C_{\delta v}(\tau) = \overline{\delta v(t) \times \delta v(t + \tau)} \quad (3.22)$$

Remarquons que, pour $\tau = 0$, la fonction d'autocorrélation s'écrit :

$$C_{\delta v}(0) = \overline{\delta v(t) \times \delta v(t)} = \overline{\delta v^2} \quad (3.23)$$

et correspond donc à la variance des fluctuations de la vitesse. On peut alors écrire $C_{\delta v}(\tau)$ sous la forme :

$$C_{\delta v}(\tau) = \overline{\delta v^2} \times c_{\delta v}(\tau) \quad (3.24)$$

où $c_{\delta v}(\tau)$ est la fonction d'autocorrélation normalisée des fluctuations de la vitesse. Celle-ci a

été reportée sur la figure 3.27 pour différents champs électriques et densités d'électrons libres. Nous pouvons remarquer que, pour de faibles valeurs du champ électrique, c'est à dire près

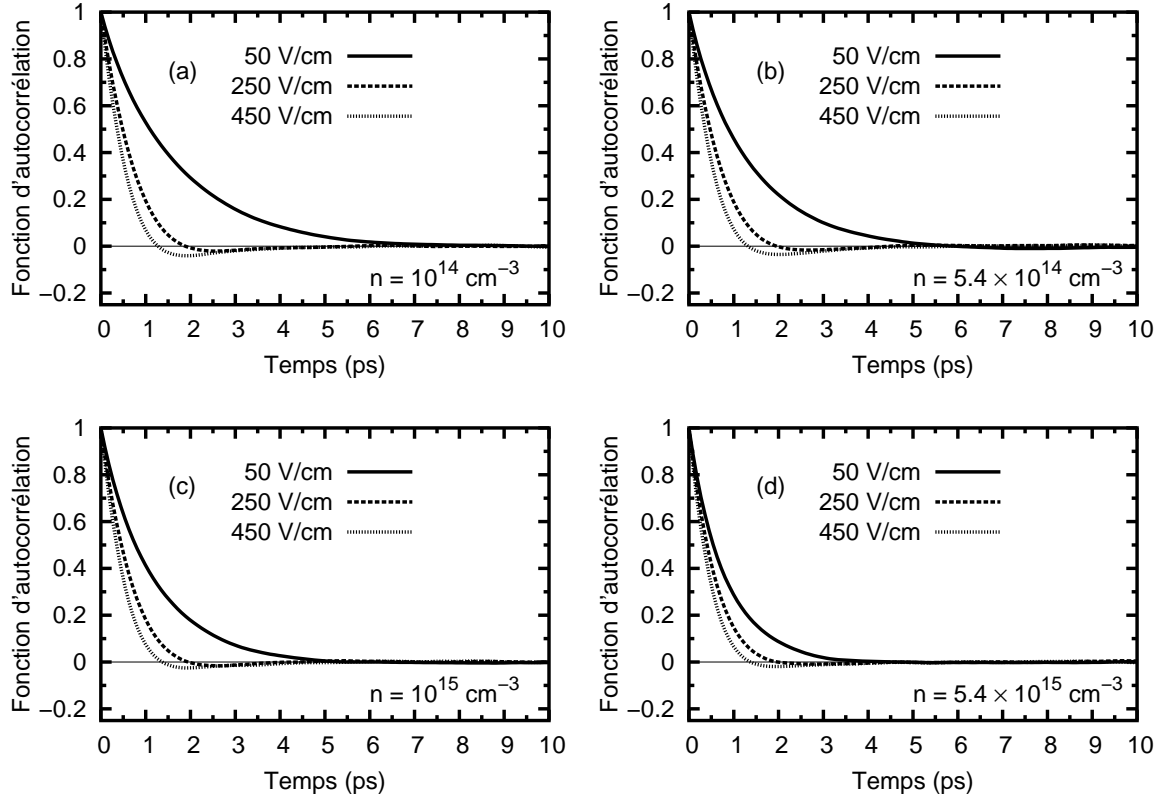


Figure 3.27 : Fonction d'autocorrélation normalisée de la vitesse d'un électron en fonction du temps pour différentes valeurs du champ électrique et de la densité électronique.

de l'équilibre thermodynamique, la fonction d'autocorrélation de la vitesse est de la forme

$$c_{\delta v}(t) = \exp \left[\frac{-t}{\tau_c} \right] \quad (3.25)$$

où τ_c est le temps de collision, relatif à la définition de la mobilité :

$$\mu = e\tau_c/m^* \quad (3.26)$$

Au fur et à mesure que le champ électrique augmente, la décroissance des fonctions d'auto-

corrélacion se fait plus rapide. Nous avons calculé τ_c en approchant les courbes de la fonction d'autocorrélation $c_{\delta v}(\tau)$ par l'expression 3.25, et en négligeant leurs déviations de l'allure exponentielle. Les résultats reportés sur la figure 3.28 montrent que le temps de collision est d'autant plus petit que le champ électrique est important, et ce quelle que soit la densité d'électrons libres. Cela est imputable à l'efficacité croissante des collisions à mesure que le champ électrique augmente et est de fait une conséquence du régime de porteurs chauds.

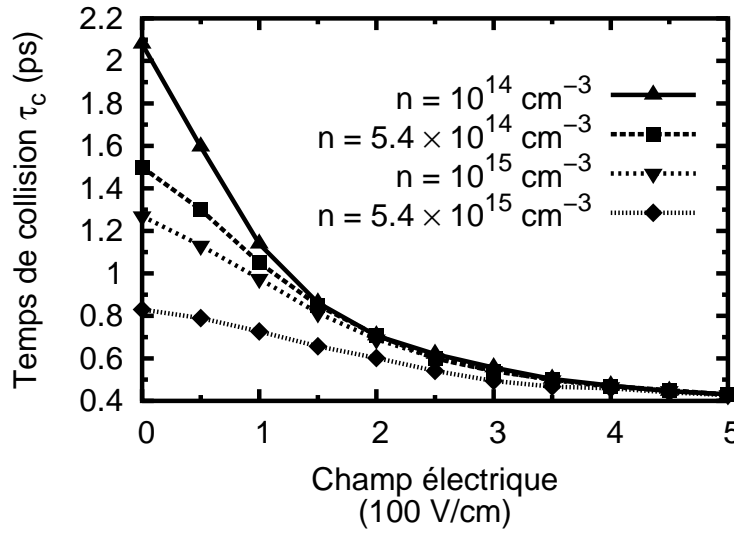


Figure 3.28 : Temps de collision τ_c en fonction du champ électrique pour différentes densités électroniques.

Pour les faibles champs électriques, le temps de collision est d'autant plus petit que la densité électronique est importante. En effet, pour des dopages plus élevés, les collisions avec les impuretés ionisées sont plus efficaces. Du coup, la durée qui leur est nécessaire pour modifier complètement la vitesse d'un électron est plus courte. Aux forts champs électriques, les collisions sur les impuretés ne sont plus prépondérantes et ne contrôlent que très peu la mobilité électronique. De fait, l'influence de la densité de dopage sur τ_c s'amenuise au fur et à mesure que le champ électrique augmente, jusqu'à devenir négligeable.

La mobilité électronique, calculée à partir des valeurs de τ_c à travers la relation (3.26), est reportée sur la figure 3.29 sous la forme de carrés vides. Du fait de la diminution du temps de collision et de l'augmentation de la masse effective moyenne, la mobilité décroît en fonction du champ électrique. Nous observons de plus un bon accord entre les valeurs obtenues et

celles déduites précédemment de la vitesse de dérive (reportées sous la forme de triangles pleins). Ce dernier point confirme la validité des valeurs obtenues pour τ_c .

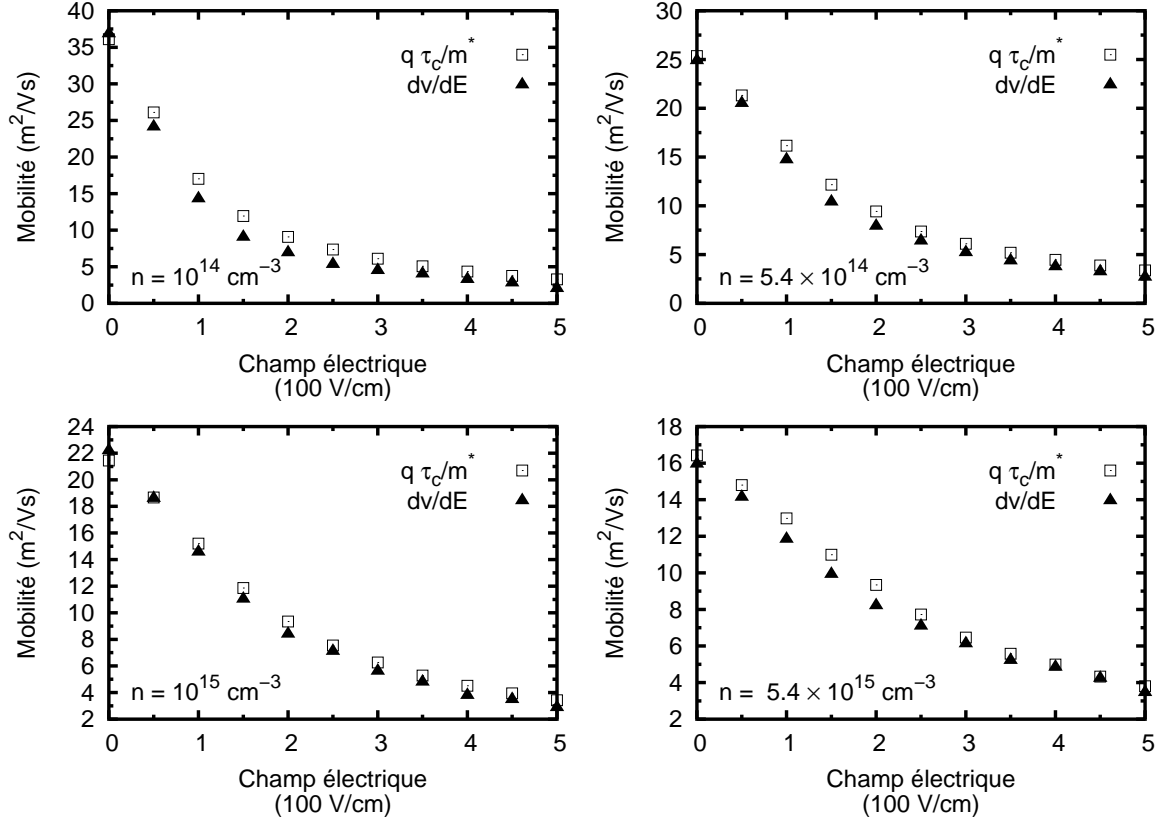


Figure 3.29 : Mobilité différentielle électronique en fonction du champ électrique calculée à partir de τ_c (carrés vides) et de la vitesse de dérive (triangles pleins) pour différentes densités électroniques.

Remarquons enfin que, pour des champs suffisamment élevés, les courbes de $c_{\delta v}(t)$ présentent une petite partie négative qui peut être attribuée au couplage entre les processus de relaxation de l'énergie et de la vitesse [Kuhn *et al.*, 1990] et dont l'aire est d'autant plus grande que le champ électrique est important. Cette partie négative correspond aux électrons dont la vitesse, initialement inférieure à la vitesse moyenne, devient supérieure à cette dernière au bout de 1 à 2 ps.

Nous avons reporté sur la figure 3.30 la variance $\overline{\delta v^2}$ en fonction du champ électrique pour les différentes densités d'électrons libres considérées. Nous pouvons remarquer que celle-ci

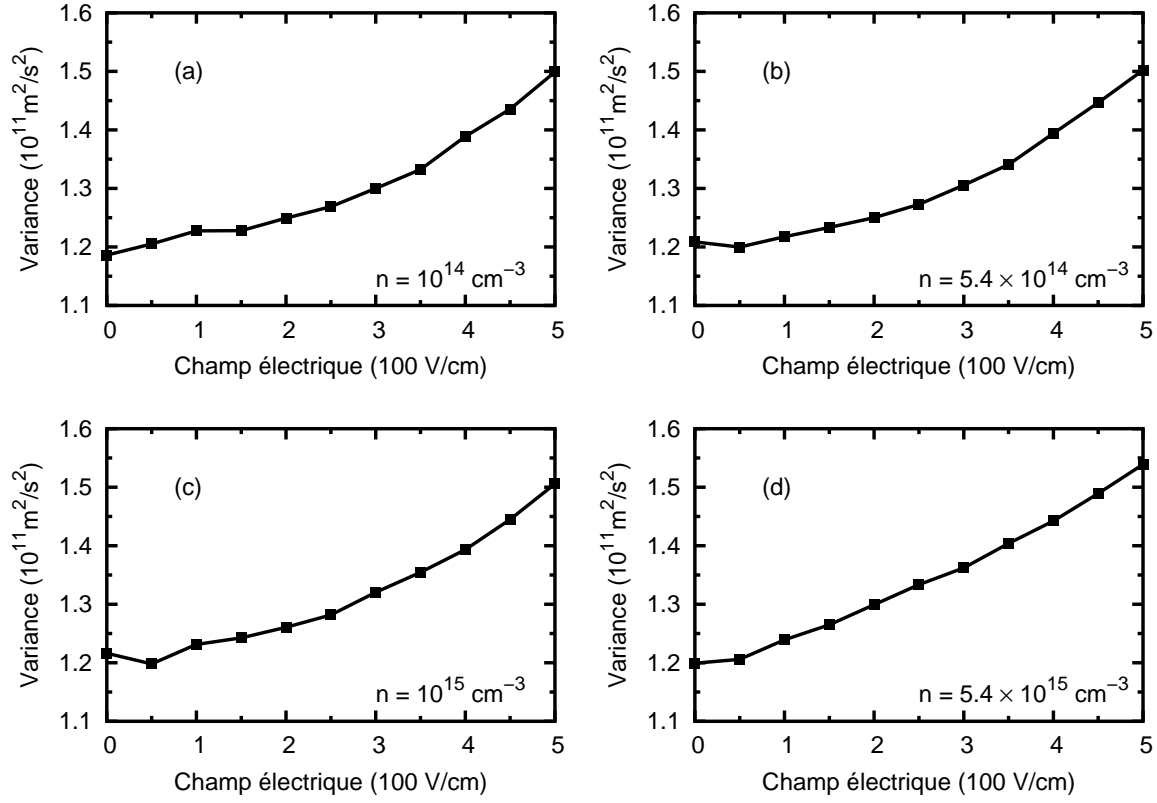


Figure 3.30 : Variance des fluctuations de la vitesse électronique en fonction du champ électrique pour différentes densités électroniques.

augmente avec le champ électrique. En effet, la variance des fluctuations de la vitesse est liée à une énergie cinétique moyenne et suit, de fait, un comportement similaire vis-à-vis du champ électrique.

Calculons à présent la densité spectrale du bruit de diffusion. Du fait de la parité de la fonction d'autocorrélation en régime stationnaire, l'équation (3.21) est ramenée à :

$$S_{\delta v}(f) = 4 \int_0^{\infty} \cos(2\pi f\tau) C_{\delta v}(\tau) d\tau \quad (3.27)$$

La figure 3.31 montre qu'à 50 V/cm, les courbes de la densité spectrale de bruit de diffusion

sont des lorentziennes, de la forme :

$$S_{\delta v}(f) = 4 \overline{\delta v^2} \frac{\tau_c}{1 + (2\pi f \tau_c)^2} \quad (3.28)$$

Pour des champs électriques élevés, on voit apparaître une bosse au niveau de la fréquence de coupure, qui correspond à la partie négative de la fonction de corrélation.

Si l'on regarde le plateau de la densité spectrale, on s'aperçoit que la valeur de celui-ci diminue à mesure que le champ électrique augmente. En effet, le temps de collision diminuant plus que ce que la variance augmente (voir les figures 3.28 et 3.30) le produit $\overline{\delta v^2} \tau_c$ est décroissant.

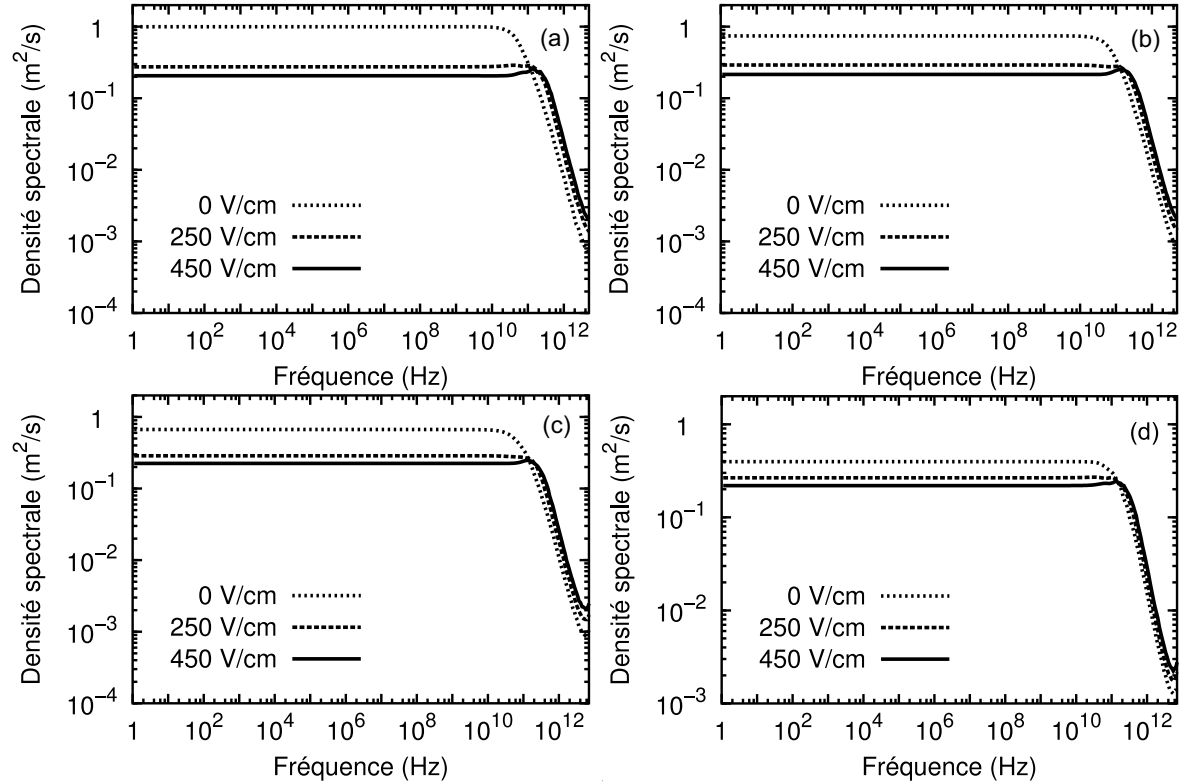


Figure 3.31 : Densité spectrale des fluctuations de la vitesse en fonction de la fréquence pour $n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ (a), $n = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ (b), $n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (c) et pour $n = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ (d).

3.4.2 Coefficient et longueur de diffusion

En négligeant l'interaction électron-électron dans le modèle Monte Carlo, le coefficient de diffusion peut être déduit de la valeur du bruit de diffusion à fréquence nulle. Quel que soit le champ électrique, il vérifie la relation [Varani et Reggiani, 1994] :

$$D = \frac{1}{4} S_{\delta v}(0) \quad (3.29)$$

c'est à dire que :

$$D = \int_0^{\infty} C_{\delta v}(\tau) d\tau \quad (3.30)$$

Nous avons reporté sur la figure 3.32 le coefficient de diffusion statique en fonction du champ électrique pour différentes densités d'électrons libres. À l'image du plateau de la densité

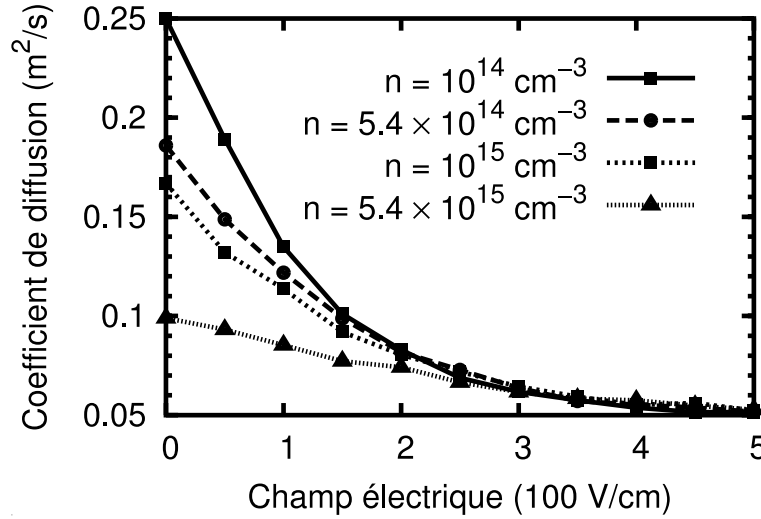


Figure 3.32 : Coefficient de diffusion en fonction du champ électrique pour différentes densités d'électrons libres.

spectrale, le coefficient de diffusion décroît à mesure que le champ électrique augmente, et ce quelle que soit la densité électronique. De fait, tout comme les autres paramètres de transport présentés précédemment, le coefficient de diffusion est affecté par le régime de porteurs chauds. Nous pouvons aussi observer que, pour un champ électrique donné, le coefficient de diffusion est d'autant plus faible que la densité électronique est importante. Par conséquent, dans le cadre d'un modèle dérive-diffusion, l'introduction d'une loi $D(E)$ décrivant l'évolution du

coefficient de diffusion avec le champ électrique, permet une approche plus fidèle à la réalité.

Remarquons enfin que, à champ électrique nul, nos calculs du coefficient de diffusion peuvent être reliées à ceux de la mobilité à travers la relation d'Einstein (3.18), comme le montre la figure 3.33.

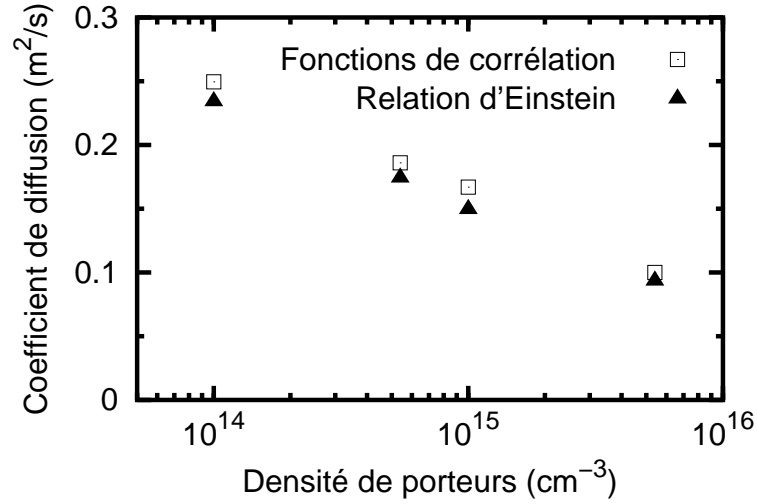


Figure 3.33 : Coefficient de diffusion en régime ohmique, calculé par les fonctions d'autocorrélation (carrés vides) et à partir de la mobilité ohmique à travers la relation d'Einstein (triangles pleins) en fonction de la densité d'électrons libres.

Comme nous l'avons fait pour les autres paramètres de transport, nous avons approché les courbes du coefficient de diffusion par des expressions analytiques. Pour ce faire nous avons considéré l'expression [Ali Omar et Reggiani, 1987] :

$$D(E) = \frac{D_0}{(1 + (E/E_c)^\beta)^\zeta} \quad (3.31)$$

où les grandeurs E_c , D_0 , β et ζ sont des paramètres à déterminer. Les courbes du coefficient de diffusion calculées par le simulateur Monte Carlo et celles correspondant aux expressions analytiques sont tracées sur la figure 3.34. Les valeurs des paramètres sont reportées pour les différentes densités électroniques considérées dans le tableau 3.8.

La température de bruit T_N , grandeur qui peut être mesurée expérimentalement, a été

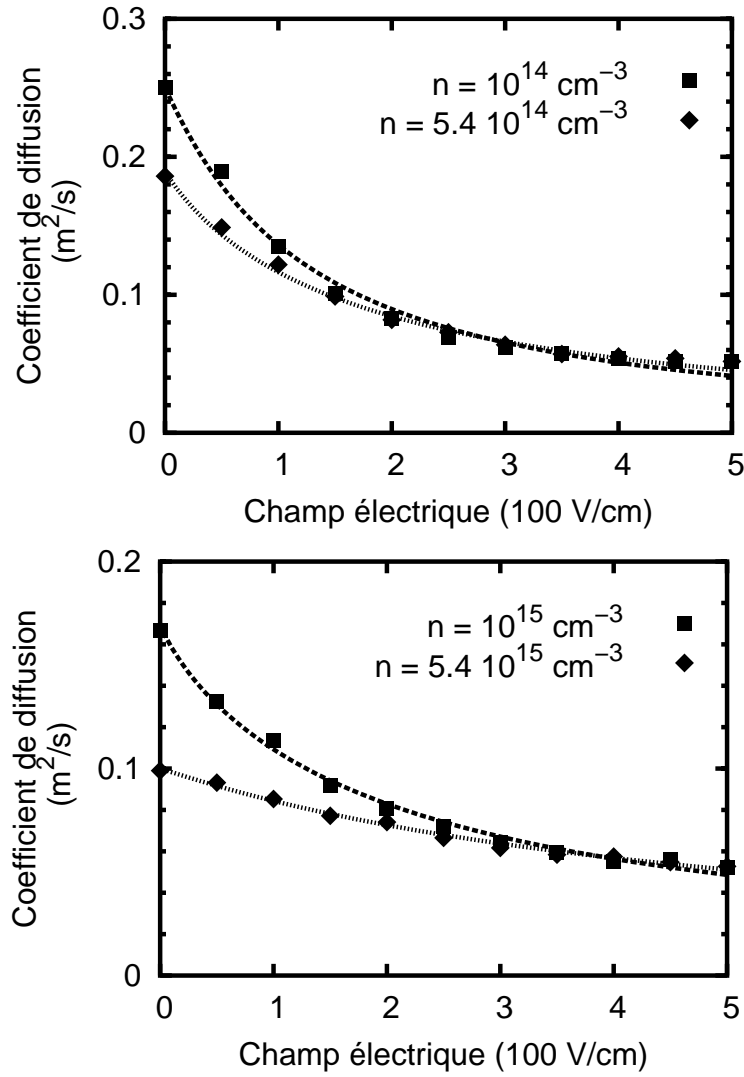


Figure 3.34 : Coefficient de diffusion calculé par le simulateur Monte Carlo (symboles) et expressions analytiques (lignes) en fonction du champ électrique et pour les différentes densités électroniques considérées.

$n \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	$D_0 \text{ (m}^2\text{/s)}$	$E_c \text{ (V/cm)}$	β	ζ
10^{14}	0.25	148	1.04	1.09
5.4×10^{14}	0.19	218	0.93	1.24
10^{15}	0.17	268	0.87	1.25
5.4×10^{15}	0.10	494	1.03	0.96

Tableau 3.8 : Valeurs des paramètres utilisés pour exprimer analytiquement le coefficient de diffusion.

calculée à l'aide des résultats obtenus pour le coefficient de diffusion et de la mobilité différentielle à travers la relation :

$$T_N = \frac{e D}{k_B \mu'} \quad (3.32)$$

Les résultats obtenus sont reportés sur la figure 3.35. Nous pouvons observer que, à champ

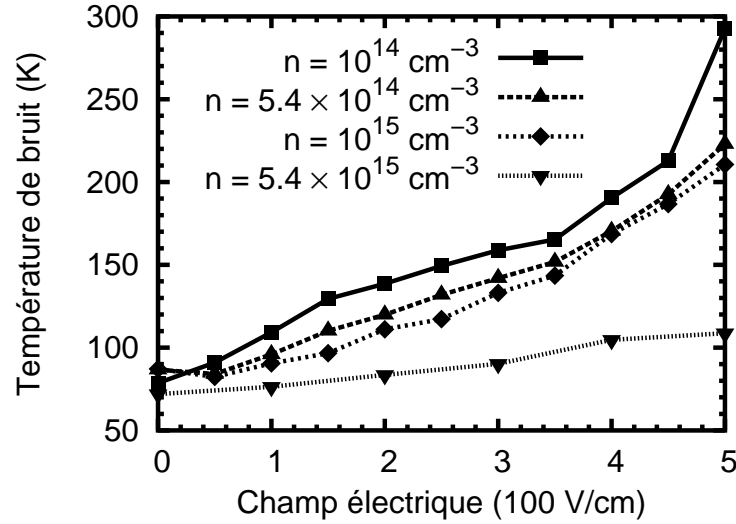


Figure 3.35 : Température de bruit en fonction du champ électrique pour différentes densités électroniques.

nul, la température de bruit est égale à la température du réseau T : dans ces conditions, l'expression 2.49 est bien ramenée à la relation d'Einstein. Toutefois, celle-ci augmente avec le champ électrique, la diminution de la mobilité différentielle étant prépondérante devant celle du coefficient de diffusion. Notons enfin que, pour un champ électrique donné, T_N est d'autant plus importante que la densité électronique est faible.

À partir du coefficient de diffusion et du temps de collision, nous pouvons calculer la longueur de diffusion L_D , donnée par la relation [Mathieu, 2001] :

$$L_D = \sqrt{D\tau_c} \quad (3.33)$$

En l'absence de champ électrique, les électrons libres diffusent à travers un mouvement brownien du fait de leur excitation thermique : la longueur de diffusion nous informe sur la façon

dont les porteurs s'étalent dans l'espace. Sa connaissance est particulièrement importante dans le cas des matériaux photovoltaïques, tels que le MCT, où les polarisations sont peu importantes. En effet, elle détermine dans ce cas la proportion de porteurs photo-générés qui seront en mesure d'atteindre la zone de charge d'espace d'une jonction pn et d'être ainsi collectés. La figure 3.36 montre que L_D diminue à mesure que le champ électrique augmente. En effet, le coefficient de diffusion D et le temps de collision τ_c , dont il est le produit, sont tous deux des grandeurs décroissantes avec le champ électrique.

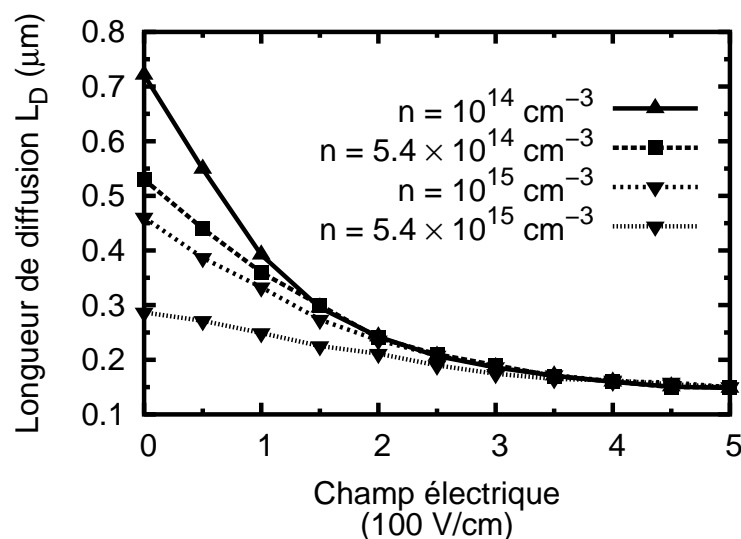


Figure 3.36 : Longueur de diffusion des électrons en fonction du champ électrique pour différentes valeurs de la densité électronique.

Conclusion

Nous avons mis en place des outils de simulation, basés sur les méthodes Monte Carlo et hydrodynamique, capables de décrire les paramètres de transport en régimes stationnaire et transitoire ainsi que le bruit. Les grandeurs stationnaires, qui ne sont pour la majorité pas présentes dans la littérature, ont été explicitées puis approchées par des expressions analytiques afin de permettre leur utilisation dans des simulateurs macroscopiques. Nous avons mis en évidence l'importance du régime de porteurs chauds qui apparaît, dans le MCT, dès de faibles champs électriques, puisque d'environ 50 V/cm . La grande mobilité du matériau,

de l'ordre de $10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ en régime ohmique, a été vérifiée. Au même titre que la vitesse de dérive et l'énergie moyenne des électrons, celle-ci subit les conséquences du régime de porteurs chauds et nous avons pu observer sa décroissance avec le champ électrique.

Nous avons par la suite décrit les grandeurs transitoires à l'aide d'un simulateur hydrodynamique. Les résultats de celui-ci ont été comparés à nos calculs Monte Carlo et nous avons pu vérifier un excellent accord. Après avoir calculé le taux de génération et exprimé sa dépendance en fonction du champ électrique à l'aide de la formule de Shockley, nous avons simulé l'évolution dans le temps de la densité d'électrons. L'étude transitoire a confirmé que les effets de la recombinaison Auger peuvent être négligés en deçà de 50 ns. Elle est toutefois responsable de la mise en place d'un régime stationnaire pour des durées de l'ordre d'un dixième de microseconde. Nous avons montré que la multiplication électronique atteinte en régime stationnaire est d'autant plus importante que la densité électronique est faible, du fait de la dépendance de la recombinaison Auger envers la densité de porteurs libres. Remarquons que quand la densité d'électrons augmente dans des proportions comparables à la densité à champ nul, la densité de trous subit pour sa part une très forte augmentation. En effet, si elle est initialement négligeable, chaque processus d'ionisation par impact crée autant de trous que d'électrons.

À l'image de la densité électronique, la densité de courant subit une augmentation dans le temps, d'autant plus importante que le champ électrique est élevé. On voit toutefois apparaître deux temps caractéristiques : le premier, de l'ordre de la picoseconde, correspond à la réponse de la vitesse et est relié aux différents mécanismes de collision. Le second, d'à peu près $0.1 \mu\text{s}$, est quant à lui relatif aux processus de génération et de recombinaison Auger.

Enfin, nous avons calculé la densité spectrale de bruit dans le matériau et extrait par là même le coefficient de diffusion, ouvrant ainsi des perspectives intéressantes pour des simulations basées sur le modèle dérive-diffusion. La température de bruit ainsi que la longueur de diffusion ont elles aussi été calculées.

Cette étude statique nous a permis de mettre en évidence les conséquences liées aux processus de génération et de recombinaison Auger et de souligner les constantes de temps relatives

aux différents phénomènes physiques considérés. De plus, nous avons mis en place un simulateur en mesure de modéliser correctement la réponse transitoire des paramètres de transport et qui sera de ce fait capable de décrire le régime dynamique. À présent, une caractérisation des formes d'ondes en fonction de leurs effets sur les paramètres de transport peut être menée.

Chapitre 4

Étude du régime dynamique

Sommaire

Introduction	137
4.1 Étude du régime petit-signal	139
4.1.1 La théorie de la réponse linéaire	140
4.1.2 Détermination de la fonction de réponse et de la mobilité différentielle à l'aide du modèle hydrodynamique	141
4.2 Étude du régime grand-signal	150
4.2.1 Signal harmonique	151
4.2.2 Impulsions	160
4.2.3 Trains d'impulsions	163
4.2.4 Impulsions hyperfréquence	167
4.2.5 Trains d'impulsions hyperfréquence	168
Conclusion	171

Introduction

L'énergie des photons associés à une onde hyperfréquence irradiant le MCT n'est pas suffisante pour permettre la libération d'électrons de la bande de valence par photo-excitation, et ce en dépit du faible gap du matériau. Toutefois, l'incidence d'une telle radiation donne

naissance, au sein du matériau, à un champ électrique qui est pour sa part en mesure d'influencer la dynamique des électrons libres. Dans le chapitre précédent, consacré à l'étude du régime statique, les phénomènes physiques intervenant sur le comportement électronique du matériau, ainsi que leurs effets sur ce-dernier, ont pu être mis en évidence. Ainsi, nous avons montré que la génération électronique, due aux phénomènes d'ionisation par impact, influence la densité d'électrons à partir de champs électriques d'environ 100 V/cm et que la dégradation des paramètres cinétiques de transport, du fait de la mise en place du régime de porteurs chauds, intervient dès 50 V/cm. En ce sens, des champs électriques associés à des ondes électromagnétiques hyperfréquences de fortes puissances semblent être en mesure de perturber le comportement électronique du matériau, en induisant en particulier une augmentation de la densité de courant.

Dans le cas d'un semiconducteur à applications optoélectroniques, le courant d'obscurité, qui ne traduit aucun signal lumineux, doit être rendu aussi faible que possible afin de permettre un fonctionnement optimal du photodétecteur : toute génération de porteurs libres par un autre biais que celui de l'absorption optique doit par conséquent être évitée. Si des dispositifs de refroidissement peuvent être mis en oeuvre pour limiter autant que faire se peut la génération thermique, les processus d'ionisation par impact ne peuvent pour leur part être évités dès lors que le champ électrique permet leur activation. Il est par conséquent intéressant d'étudier les effets d'un champ électrique oscillant sur la génération électronique dans le MCT. Pour ce faire, nous menons dans ce chapitre une étude dynamique du transport électronique, en commençant par nous intéresser au régime petit-signal. En effet, si l'étude de ce dernier peut être assimilée à une évaluation des effets d'un champ hyperfréquence de faible puissance sur le matériau, elle donne avant tout de nombreuses informations sur la réponse fréquentielle du gaz électronique. Celle-ci est faite à travers le développement et l'application au cas du MCT d'une méthode permettant d'exprimer sous forme analytique la mobilité différentielle en fréquence et de décrire, par là même, la dynamique des porteurs de charges. Cette méthode, basée sur la théorie de la réponse linéaire, repose sur une simplification des équations de balance de la vitesse et de l'énergie et nous mettons de fait en oeuvre le modèle

hydrodynamique mis en place au chapitre précédent. Remarquons que la fiabilité de ce dernier quant aux résultats obtenus en régime transitoire a été vérifiée et qu'il est par conséquent parfaitement adapté à l'étude dynamique que nous menons ici.

Nous nous intéressons enfin au régime grand-signal dans le but d'évaluer l'influence d'un champ électrique engendré par une onde hyperfréquence de forte puissance sur les paramètres de transport du MCT. L'étude est réalisée à travers l'approche hydrodynamique, et une attention particulière est prêtée à l'évolution de la densité électronique sous l'effet de la perturbation. Plusieurs formes d'ondes sont considérées, pouvant correspondre à différentes perturbations émises par un radar, et l'influence des différents paramètres (amplitude, fréquence, durée d'impulsion, etc.) est évaluée.

4.1 Étude du régime petit-signal

L'étude de la mobilité différentielle en fréquence permet l'évaluation des performances hyperfréquences des matériaux et dispositifs semiconducteurs [Grubin *et al.*, 1988]. En effet, elle décrit la réponse de la dynamique des porteurs de charges à une perturbation harmonique petit-signal du champ électrique, et ce en fonction de la fréquence.

Dans le cadre de nos travaux, les micro-ondes incidentes sont modélisées sous la forme de champs oscillants venant se superposer au champ électrique régnant déjà au sein du matériau. Dans ces conditions, une étude du régime petit-signal peut s'apparenter à une évaluation du comportement électronique du matériau lorsqu'il est exposé à une onde hyperfréquence de faible puissance et présente par conséquent un grand intérêt. En effet, elle permet de voir si des instabilités, des oscillations ou des amplifications sont susceptibles d'apparaître, en régime dynamique, dans certains domaines de fréquences.

Dans cette section, nous développons une méthode permettant d'exprimer sous forme analytique la mobilité différentielle en fréquence d'un matériau semiconducteur, et en particulier du MCT. Celle-ci est basée sur le modèle hydrodynamique et trouve sa source dans la théorie de la réponse linéaire.

4.1.1 La théorie de la réponse linéaire

Dans un semiconducteur homogène soumis à un champ statique \mathbf{E} et se trouvant en conditions stationnaires, la vitesse de dérive des électrons \mathbf{v} est fonction du champ électrique. Si l'on superpose à ce champ une légère perturbation harmonique de faible amplitude $\delta\mathbf{E}(\omega)$ alors on retrouve une perturbation de la vitesse de dérive $\delta\mathbf{v}(\omega)$ elle aussi harmonique et pouvant s'écrire sous la forme :

$$\delta\mathbf{v}(\omega) = \mu'_v(\omega)\delta\mathbf{E}(\omega) \quad (4.1)$$

La grandeur $\mu'_v(\omega)$ est le tenseur mobilité différentielle en fréquence. Dans ce travail, le champ de polarisation est imposé le long de l'un des axes de symétrie du semiconducteur et la perturbation est appliquée dans la direction parallèle à celle du champ électrique, de sorte que $\delta\mathbf{v}$ et $\delta\mathbf{E}$ sont colinéaires. De fait, le tenseur $\mu'_v(\omega)$ est ramené à une grandeur complexe représentant la mobilité différentielle longitudinale en fréquence et reliant la grandeur $\delta E = |\delta\mathbf{E}|$ à la valeur complexe de $\delta\mathbf{v}(\omega)$, notée $\delta v(\omega)$, à travers la relation simple [Vaissière *et al.*, 1994] :

$$\delta v(\omega) = \mu'_v \delta E(\omega) \quad (4.2)$$

La réponse de la vitesse de dérive à une petite perturbation $\delta E(t)$ entre dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire, et de fait $\delta v(t)$ s'exprime par la relation de convolution [Price, 1982] :

$$\delta v(t) = e \int_0^t K_v(s) \delta E(t-s) ds \quad (4.3)$$

où $K_v(s)$ est la fonction de réponse de la vitesse, et e la charge élémentaire. Si l'on considère une perturbation électrique du type $\delta E(t) = \delta E \cos(\omega t)$ et que l'on utilise les notations complexes, l'équation (4.3) est ramenée à :

$$\delta v(t) = e \left\{ \int_0^t K_v(s) \delta E \cos[\omega(t-s)] ds + j \int_0^t K_v(s) \delta E \sin[\omega(t-s)] ds \right\} \quad (4.4)$$

Si maintenant on insère la relation (4.2) dans cette dernière équation et si l'on considère des

temps très longs, alors la mobilité différentielle en fréquence s'exprime par la transformation de Fourier [Gruzhinskis *et al.*, 1993] :

$$\mu'_v(\omega) = e \left[\int_0^\infty K_v(s) \cos(\omega s) ds - j \int_0^\infty K_v(s) \sin(\omega s) ds \right] \quad (4.5)$$

Par conséquent, l'expression de la mobilité différentielle en fréquence $\mu'_v(\omega)$ ne dépend que de la fonction de réponse du système $K_v(s)$, qu'il s'agit de fait d'expliciter correctement.

4.1.2 Détermination de la fonction de réponse et de la mobilité différentielle à l'aide du modèle hydrodynamique

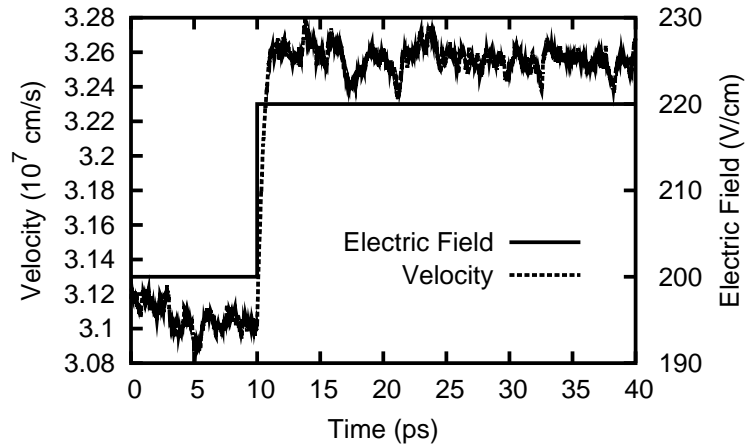


Figure 4.1 : Réponse de la vitesse de dérive des électrons à un échelon de champ électrique calculée par le simulateur Monte Carlo.

La fonction de réponse peut être obtenue de façon simple en décrivant la réponse de la vitesse de dérive à un signal de Dirac $\delta(t)$. En effet, si dans la relation (4.3) on pose $\delta E(t-s) = \delta E \delta(t-s)$, où δE est un champ électrique constant, alors celle-ci se ramène à

$$\delta v(t) = e \delta E \int_0^t K_v(s) \delta(t-s) ds = e \delta E K_v(t) \quad (4.6)$$

Toutefois, dans le cadre d'une étude simulée, l'échantillonnage du temps ne permet pas d'appliquer de façon correcte un signal de Dirac, l'intervalle séparant deux instants ne pouvant pas tendre vers zéro. Pour contourner ce problème nous appliquons, en lieu et place du signal

de Dirac, un signal de Heavyside $\delta E \theta(t)$ qui n'est autre que sa primitive. Afin de rester dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire, δE doit être choisi aussi petit que possible. Dans ces conditions, l'équation (4.3) s'écrit sous la forme :

$$e \int_0^t K_v(s) \delta E \theta(t-s) ds = \delta E \int_s^t K_v(s) ds = \delta v(t) \quad (4.7)$$

et, de fait :

$$K_v(t) = \frac{1}{e \delta E} \frac{d}{dt} \delta v(t) \quad (4.8)$$

La fonction de réponse du système $K_v(s)$ peut par conséquent être obtenue en dérivant dans le temps la réponse temporelle de la vitesse de dérive.

Nous avons effectué une première approche Monte Carlo en appliquant au matériau un échelon de champ électrique afin d'extraire la réponse de la vitesse de dérive. Pour ne pas sortir du régime linéaire, l'amplitude de l'échelon a été prise égale à 10 % du champ électrique initial. La vitesse ainsi que le champ électrique sont reportés en fonction du temps sur la figure 4.1 et nous pouvons voir que, si la vitesse de dérive répond bien au champ électrique, cette réponse est bruitée. Ce bruit est dû à la nature stochastique de la méthode de Monte Carlo. S'il peut être atténué en augmentant les temps ou le nombre de porteurs simulés, il ne peut en aucun cas être complètement annulé, ce qui pose d'importants problèmes dès lors que l'on cherche à dériver le signal obtenu. En effet, même dans le cas où les amplitudes des fluctuations sont très faibles, leurs variations dans le temps peuvent rester très importantes et, de fait, compromettre la dérivation temporelle du signal.

Simulation hydrodynamique

Le modèle hydrodynamique étant de nature déterministe, il ne pose pas ce problème et offre de fait une excellente alternative à la méthode Monte Carlo. Nous mettons alors en oeuvre le simulateur hydrodynamique mis en place au chapitre précédent et adapté à l'étude du matériau homogène. Celui-ci permettant de décrire de façon correcte le régime transitoire, il peut être utilisé avec confiance dans le cadre d'une étude dynamique.

Remarquons que les processus de génération et de recombinaison Auger, du fait des grands temps caractéristiques qui leur sont associés, ne peuvent pas modifier de façon significative la forme de la fonction de distribution lorsqu’une faible modification du champ électrique est appliquée. De fait, nous ne nous intéressons pas, *en régime petit-signal*, à l’évolution de $n(t)$ et ne décrivons que celles de la vitesse et de l’énergie des électrons à travers les équations (2.102) et (2.103) (page 85) respectivement. Comme dans le cas statique (voir chapitre précédent), les paramètres d’entrée du simulateur hydrodynamique sont le taux de relaxation de la vitesse de dérive ν_v , celui de l’énergie moyenne ν_ϵ ainsi la masse effective moyenne m^* , que nous avons calculés à l’aide de notre simulateur Monte Carlo.

Nous avons tout d’abord reporté sur la figure 4.2 la réponse indicielle de la vitesse électronique. Celle-ci décrit un régime transitoire de quelques picosecondes avant d’atteindre une

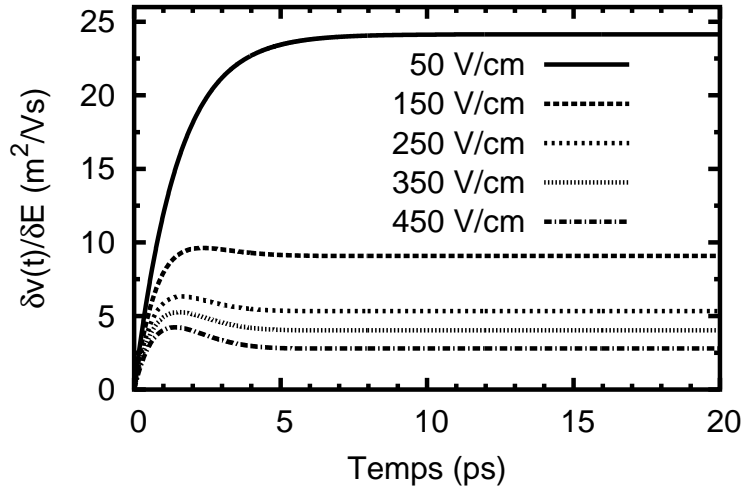


Figure 4.2 : Réponse indicielle de la vitesse électronique en fonction du temps pour différentes valeurs du champ électrique.

valeur stationnaire. Nous pouvons remarquer que, toutes proportions gardées, la réponse de la vitesse est plus faible pour les valeurs du champ électrique les plus élevées, ce qui est relié à la chute de la mobilité différentielle basse fréquence sous l’effet du régime de porteurs chauds. Nous pouvons de plus observer la présence d’effets de survitesse pour les champs électriques les plus élevés, rappelant ceux que nous avons remarqués dans le cas statique présenté dans

la section 3.2.7 (page 109).

La réponse indicielle étant la réponse de la vitesse électronique à un échelon de champ électrique, sa dérivée dans le temps n'est autre que la réponse impulsionnelle $K_v(t)$. Cette dernière a été reportée sur la figure 4.3, après avoir été normalisée à sa valeur à $t = 0$. Aux

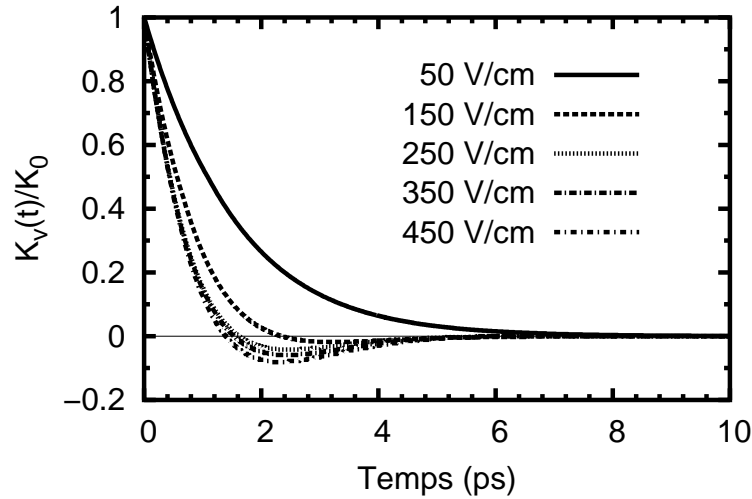


Figure 4.3 : Réponse impulsionnelle de la vitesse en fonction du temps pour différentes valeurs du champ électrique.

faibles champ électriques, nous pouvons observer que la fonction de réponse décroît dans le temps de façon exponentielle, jusqu'à s'annuler. À mesure que le champ augmente, cette décroissance se fait plus abrupte. Ainsi, on voit apparaître autour de 150 V/cm une partie négative qui est d'autant plus importante que le champ est élevé.

Par transformation de Fourier, nous avons calculé la mobilité différentielle en fréquence, et nous l'avons reportée pour différentes valeurs du champ électrique sur la figure 4.4. L'allure de ces courbes, variant beaucoup avec le champ électrique, sera discutée dans le paragraphe suivant.

Enfin, dans le but de vérifier la validité de notre simulateur hydrodynamique, nous avons comparé les valeurs obtenues pour la mobilité différentielle basse fréquence avec les résultats Monte Carlo présentés dans la section 3.2.4. La figure 4.5 montre un excellent accord entre les deux approches.

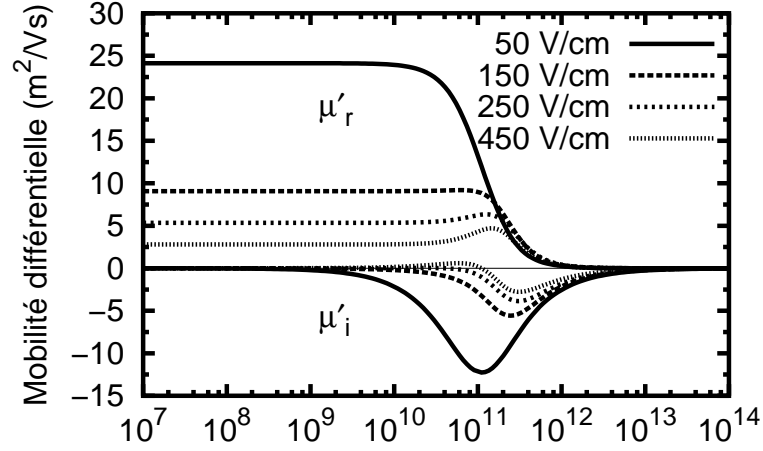


Figure 4.4 : Partie réelle (μ'_r) et partie imaginaire (μ'_i) de la mobilité différentielle en fonction de la fréquence et pour différentes valeurs du champ électrique.

Remarquons que, si l'utilisation du simulateur hydrodynamique nous a permis de calculer les différentes grandeurs permettant de décrire le régime dynamique, il n'est pas évident de relier les résultats obtenus à la dynamique des porteurs de charges. Qui plus est, une étude systématique, menée pour différentes densités électroniques et différents champs électriques, peut s'avérer fastidieuse.

La méthode analytique

Il est intéressant de développer une approche permettant de décrire le régime petit-signal en facilitant une étude systématique et offrant la possibilité de relier les résultats obtenus au comportement microscopique des porteurs de charges. Nous avons à ce titre utilisé une méthode permettant d'exprimer la fonction de réponse et la mobilité différentielle en fréquence sous formes analytiques tout en extrayant les taux de relaxation généralisés ν_+ , ν_- et ν_R (voir les relations C.24 à C.26, page 191). Celle-ci est basée sur la linéarisation des équations hydrodynamiques du fait de la faible perturbation appliquée au matériau en régime petit-signal. Une plus ample description de la méthode utilisée est faite dans l'annexe C.

La figure 4.6 montre que, quelle que soit la densité électronique considérée, les taux de re-

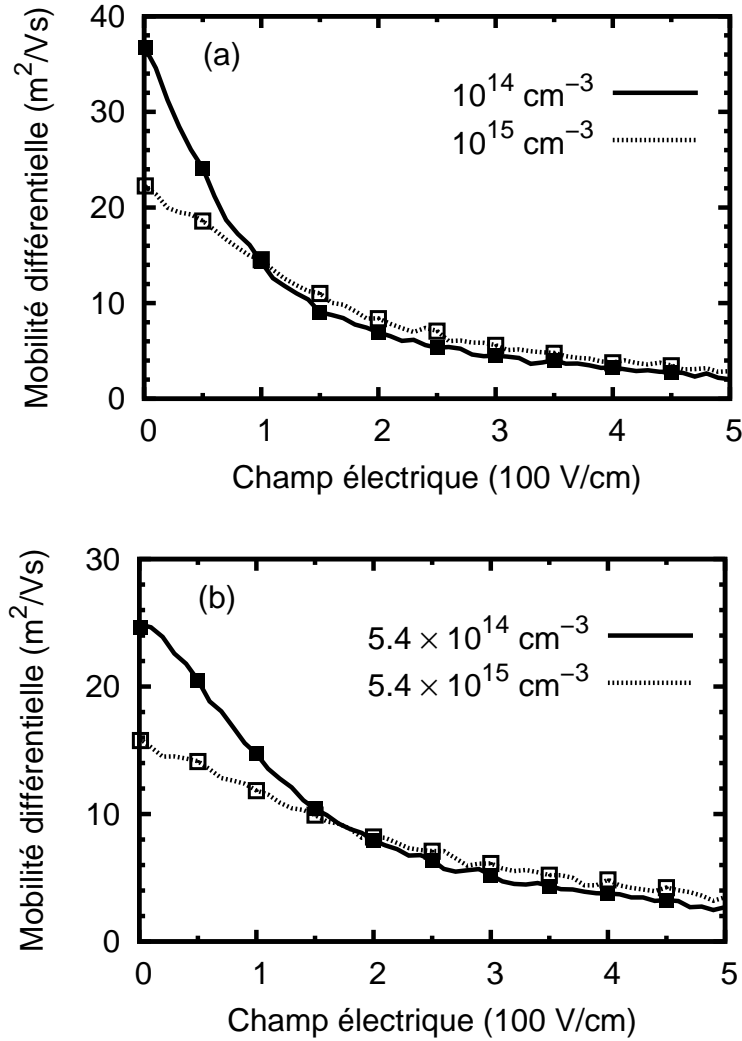


Figure 4.5 : Mobilité différentielle basse fréquence en fonction du champ électrique calculée à l'aide du modèle hydrodynamique (symboles) et du simulateur Monte Carlo (courbes) pour des densités électroniques de $n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et $n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (a) ainsi que de $n = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et $n = 5.4 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (b).

laxation généralisés sont réels aux faibles champs électriques, c'est à dire en dessous d'environ 50 V/cm, et complexes pour les champs plus élevés.

Dans le cas réel, on peut observer leur augmentation avec le champ électrique, soulignant l'efficacité croissante des processus de collision. Par analogie avec les taux de relaxation phénoménologiques présentés sur la figure 3.14 (page 109), nous pouvons assimiler ν_+ au taux

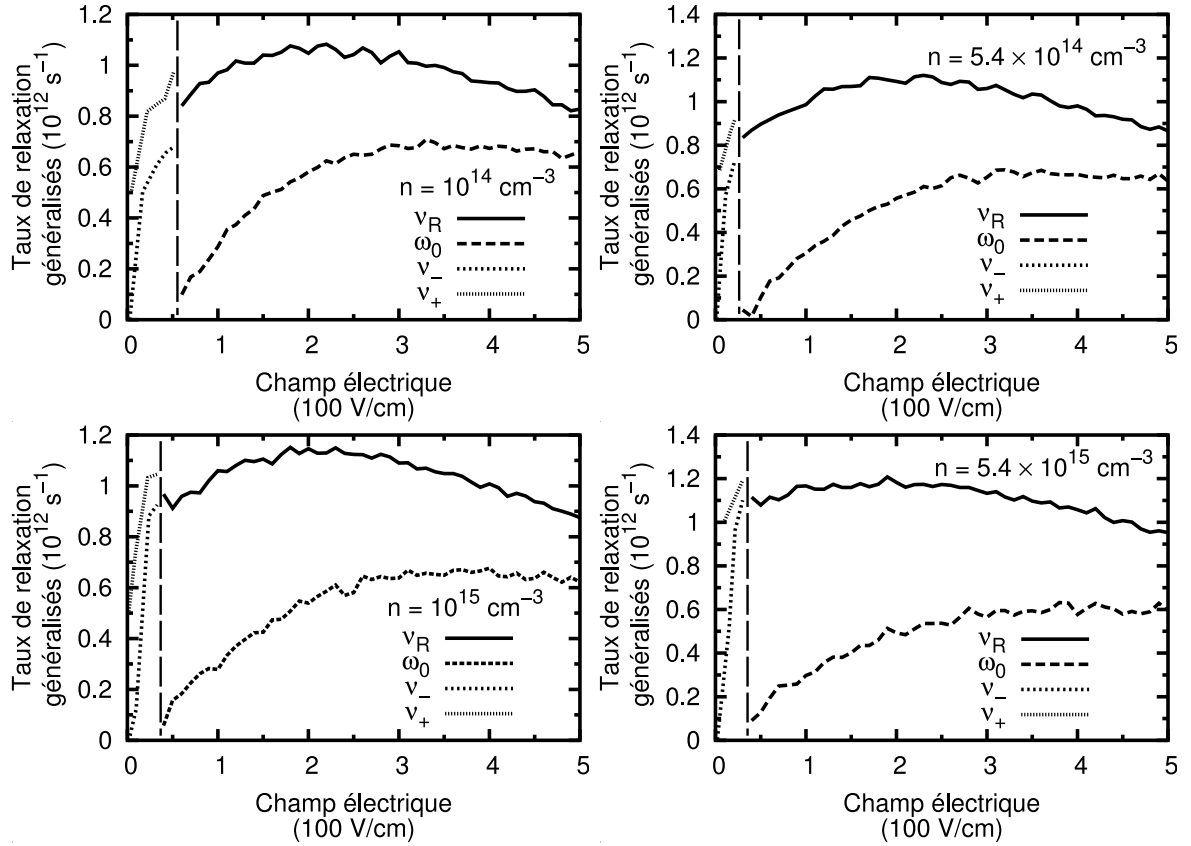


Figure 4.6 : Taux de relaxation généralisés en fonction du champ électrique pour différentes densités d'électrons libres. Se reporter à l'annexe C pour les définitions des différentes grandeurs.

de relaxation de la vitesse ν_v et ν_- à celui de l'énergie ν_ϵ .

Dans le cas complexe, la précédente analogie ne peut plus être faite. La relaxation de la vitesse et celle de l'énergie sont fortement couplées du fait de l'action jointe du champ électrique et des collisions avec les phonons optiques polaires. En effet, l'énergie des phonons étant relativement faible (voisine de 20 meV), des champs électriques modérés permettent la mise en place d'une action combinée de l'accélération et de l'émission électronique. Plus précisément, les électrons, accélérés par le champ électrique, sont en mesure d'émettre en peu de temps un phonon optique polaire avant de retourner près du fond de la bande de conduction, et ainsi de suite. Cette dynamique ordonnée explique la présence, aux forts champs électriques, d'une partie négative dans la fonction de réponse. En effet, elle est responsable de l'apparition dans

$K_v(t)$ d'une composante oscillante à la fréquence ω_0 . Toutefois, le facteur d'amortissement ν_R est plus grand que la fréquence d'oscillation ω_0 , comme le montre la figure 4.6(a), et ce qui devrait apparaître comme une oscillation se traduit par une partie négative. En outre, plus le champ électrique est élevé, plus le nombre d'électrons participant au processus décrit est grand et plus la partie négative est importante.

Nous avons reporté sur la figure 4.7 la fonction de réponse pour une densité électronique $n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et pour différentes valeurs du champ électrique en prenant soin de comparer les résultats obtenus par la méthode analytique (courbes) et ceux de notre simulateur hydrodynamique (symboles). Nous pouvons remarquer un excellent accord entre les deux approches utilisées tendant à valider nos résultats.

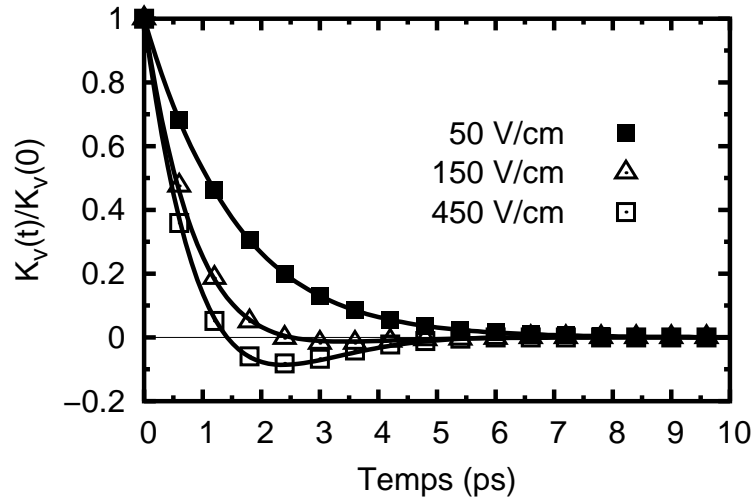


Figure 4.7 : Fonction de réponse $K_v(s)$ normalisée à sa valeur à $t = 0$ pour $n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et pour des champs électriques de 50, 150 et 450 V/cm. Les courbes correspondent aux résultats obtenus avec la méthode analytique et les symboles à ceux du simulateur hydrodynamique mis en oeuvre précédemment.

Nous avons calculé à l'aide des relations (C.35) et (C.36) la mobilité différentielle en fonction de la fréquence pour des densités électroniques de $n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et $n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$. Nous avons reporté sous forme de courbes les résultats obtenus pour différents champs électriques sur la figure 4.8 et les avons comparés à ceux du simulateur hydrodynamique, donnés sous forme de symboles. Comme dans le cas de la fonction de réponse, nous pouvons remarquer

un excellent accord entre les deux approches.

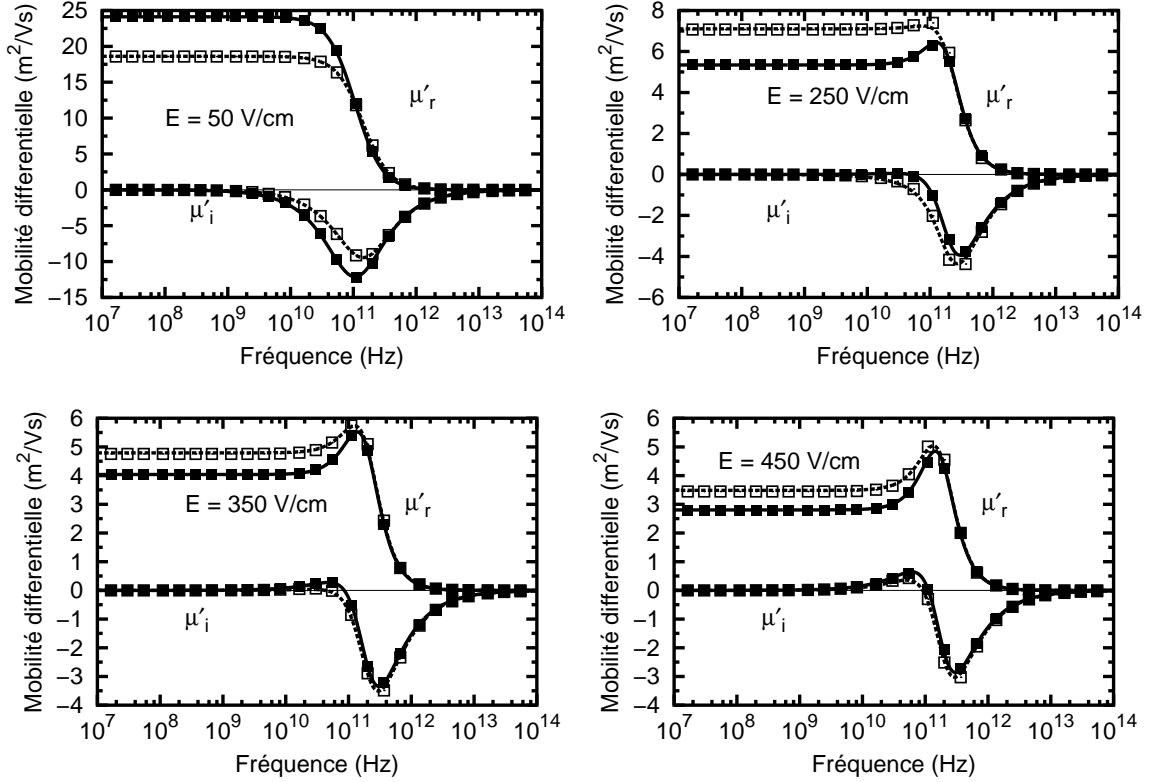


Figure 4.8 : Partie réelle (μ'_r) et partie imaginaire (μ'_i) de la mobilité différentielle en fonction de la fréquence et pour différents champs électriques. Les courbes correspondent aux résultats obtenus par la méthode analytique pour des concentrations de $n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ (traits pleins) et de $n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (pointillés). Les symboles correspondent aux résultats obtenus à l'aide du simulateur hydrodynamique pour des densités électroniques de $n = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ (carrés pleins) et de $n = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ (carrés vides).

Pour de faibles champs électriques, la partie réelle décrit une Lorentzienne, caractéristique de la mobilité en fréquence dont la fréquence de coupure se situe autour de 40 GHz. La partie imaginaire est pour sa part négative sur toute la gamme de fréquences. Elle traduit le déphasage entre le champ électrique et la vitesse électronique qui se fait de plus en plus important à mesure que l'on se rapproche de la fréquence de coupure. Ce déphasage limite l'efficacité du champ électrique sur la dynamique des porteurs qui répondent moins rapidement à la perturbation et qui présentent de fait une mobilité moins importante. Au delà de 100 GHz,

les fréquences de perturbation correspondent à des périodes d'accélération des électrons inférieures à la durée du régime transitoire de la vitesse et de l'énergie électronique, présentée au paragraphe 3.2.7 (page 109). De fait, les électrons n'ont pas le temps de prendre de la vitesse que le champ électrique a déjà changé de direction. La réponse dynamique des électrons s'en trouve alors extrêmement affectée, et la mobilité différentielle décroît, jusqu'à devenir nulle.

Pour de forts champs électriques, la partie réelle s'éloigne de la Lorentzienne et l'on voit apparaître une bosse. Celle-ci, d'autant plus importante que le champ électrique est élevé, correspond à la partie négative de la fonction de réponse que nous avons mise en évidence pour les champs élevés. Physiquement, elle se situe autour de la fréquence de résonance ω_0 du processus d'émission de phonons décrit précédemment. La partie imaginaire présente pour sa part une contribution positive dont l'importance augmente avec le champ électrique.

Remarquons que les densités électroniques plus élevées tendent à atténuer les effets du champ électrique quant à l'apparition de la bosse pour la partie réelle et de la contribution positive pour la partie imaginaire.

4.2 Étude du régime grand-signal

L'étude du régime grand-signal va nous permettre d'évaluer les effets d'une perturbation électrique de forte puissance sur le comportement électronique du matériau et présente en ce sens un intérêt fondamental. Nous avons vu précédemment que le courant d'obscurité doit être rendu aussi faible que possible dans les matériaux semiconducteurs à applications optoélectroniques afin d'être négligeable devant le signal photo-généré, et ce pour ne pas perturber l'interprétation de ce dernier. D'un autre côté, un rayonnement hyperfréquence de forte puissance semble être en mesure d'engendrer des processus de génération-recombinaison Auger en agissant sur la dynamique des porteurs libres, et par là-même d'accroître le courant d'obscurité. Afin d'évaluer dans quelles mesures les micro-ondes peuvent perturber le bon fonctionnement d'un dispositif de photodétection, nous faisons une caractérisation de différentes formes d'ondes (signal harmonique, impulsion, train d'impulsions, impulsions hyperfréquence et trains d'impulsions hyperfréquence) en estimant leurs effets sur la densité

électronique dans le matériau MCT.

Nous choisissons, pour chacun des cas abordés, une densité électronique à champ nul $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. En régime grand-signal, l'effet du champ électrique sur la densité électronique ne peut plus être négligé. Nous simulons alors, à l'aide de notre simulateur hydrodynamique, l'évolution dans le temps de la densité électronique, de la vitesse, et de l'énergie, à travers les équations (2.101), (2.102) et (2.103) (page 85) respectivement. Précisons que le taux de génération g , initialement décrit en fonction du champ électrique, a été indexé sur l'énergie pour décrire correctement la réponse en fréquence de la densité électronique.

4.2.1 Signal harmonique

Nous avons, dans un premier temps, simulé la réponse temporelle du système sous l'effet d'une perturbation harmonique de la forme :

$$E(t) = 300 \times \cos(2\pi ft) \quad (4.9)$$

Vitesse électronique

La figure 4.9 représente le spectre de la réponse de la vitesse électronique lorsque le système est soumis à une perturbation de fréquence $f = 1 \text{ MHz}$. Nous pouvons remarquer que la vitesse électronique oscille à la fréquence de perturbation mais que des harmoniques d'ordres supérieurs apparaissent aussi, du fait de la forte non-linéarité de la vitesse de dérive pour les champs électriques considérés (voir figure 3.7, page 99). La vitesse électronique pouvant être positive ou négative, suivant le signe du champ électrique et la direction dans laquelle les électrons sont accélérés, la relation $\bar{v}(E)$ est une fonction impaire, et c'est à ce titre que les harmoniques présents dans le spectre de la réponse de la vitesse sont les multiples impairs de la fréquence de perturbation f . Remarquons que l'amplitude de ces harmoniques décroît très rapidement avec la fréquence.

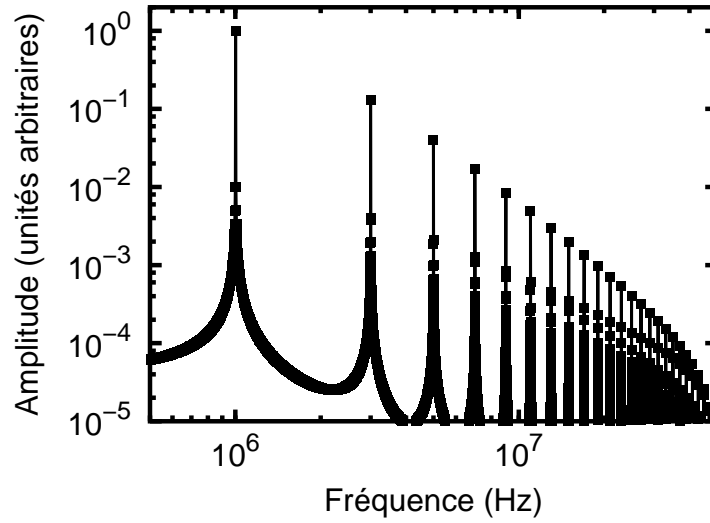


Figure 4.9 : Spectre de la réponse de la vitesse moyenne électronique \bar{v} sous l'effet d'une perturbation harmonique grand-signal de fréquence $f = 1$ MHz, avec $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

Densité électronique

En ce qui concerne la densité électronique, son évolution dans le temps sous l'effet d'une perturbation harmonique grand-signal est reportée sur la figure 4.10 pour différentes fréquences de perturbation. Comme dans le cas de la réponse à un échelon de champ électrique, présentée dans la section 3.3 (page 111), la densité électronique augmente avec le temps en décrivant un régime transitoire suivi d'un régime périodique. La durée du régime transitoire est d'environ $1 \mu\text{s}$ pour les différentes fréquences considérées, sauf pour la plus élevée d'entre elles, c'est à dire $f = 100$ GHz, pour laquelle il dure environ $2 \mu\text{s}$.

Nous pouvons remarquer que les courbes présentent des oscillations, plus ou moins importantes suivant la fréquence de perturbation. En effet, si leur amplitude est grande à 1 MHz, celles-ci se font de moins en moins importantes au fur et à mesure que la fréquence augmente, jusqu'à disparaître aux environs de 100 MHz. En fait, des fréquences de cet ordre correspondent à des périodes bien en deçà du temps caractéristique des processus de génération-recombinaison Auger, qui est d'environ $0.1 \mu\text{s}$, comme nous l'avons montré dans le chapitre précédent. Du fait, bien que les électrons puissent acquérir assez d'énergie pour ioniser le réseau cristallin, les variations de celle-ci se font trop rapidement pour que la densité

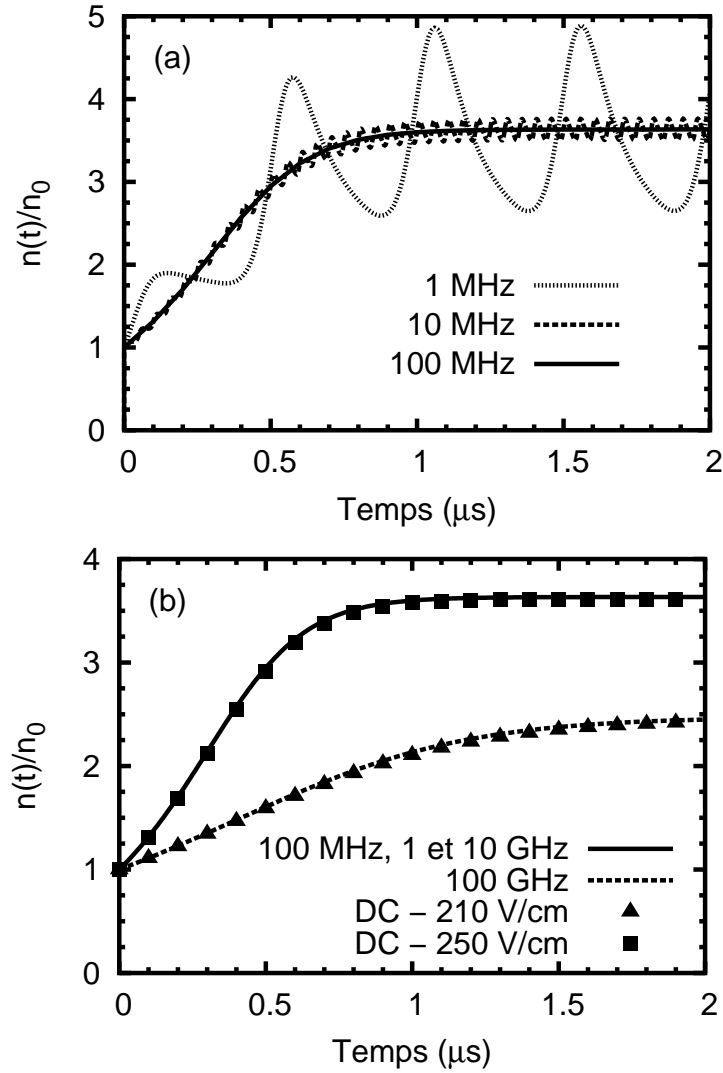


Figure 4.10 : Évolution dans le temps de la densité électronique normalisée à $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ sous l'effet d'une perturbation harmonique grand-signal (courbes) d'amplitude 300 V/cm et pour des fréquences de 1, 10 et 100 MHz (a) et de 100 MHz, 1, 10 et 100 GHz (b). Les symboles représentent l'évolution de la densité électronique sous l'effet d'un échelon de champ électrique de 210 V/cm (triangles) et de 250 V/cm (carrés).

électronique puisse être modifiée à la même fréquence. Au niveau des processus de génération, tout se passe comme si l'énergie moyenne des porteurs libres restait confinée autour d'une même valeur sur laquelle s'indexerait le taux de génération. La densité électronique augmente alors de façon monotone avant d'atteindre une valeur constante.

Pour toutes les fréquences comprises entre 100 MHz et 10 GHz, la figure 4.10(b) montre que la densité électronique évolue de façon similaire dans le cas d'une perturbation harmonique d'amplitude 300 V/cm et dans celui d'un échelon de champ électronique de 250 V/cm. Les résultats obtenus pour des fréquences de 100 MHz, 1 GHz et 10 GHz sont confondus, les oscillations dues aux processus de génération-recombinaison ayant disparu pour ces fréquences de perturbation. Toutefois, pour une fréquence de 100 GHz, les effets de la perturbation sur la densité électronique sont moindres et le cas harmonique doit être comparé aux résultats obtenus pour un échelon de champ électrique de 210 V/cm. Cela s'explique par le fait que le taux de génération électronique n'est fonction que de l'énergie. Nous avons reporté sur la figure 4.11 l'évolution dans le temps du champ électrique ainsi que de l'énergie moyenne pour des fréquences de 10 et 100 GHz. Nous pouvons remarquer que, à 10 GHz, la variation de l'énergie électronique suit celle du champ électrique. Ce n'est plus le cas à 100 GHz où le décalage temporel induit une légère baisse de l'énergie. En effet, la période durant laquelle le champ électrique accélère les électrons est de l'ordre de la durée du régime transitoire de la vitesse et de l'énergie moyenne des électrons. Dans ces conditions, la dynamique électronique prend du retard sur la perturbation électrique. La force accélératrice change alors de direction avant que l'énergie électronique ait atteint sa valeur maximale. Celle-ci s'en trouve alors amoindrie, ce qui conduit à une diminution du taux de génération Auger. Or, comme nous l'avons vu au chapitre précédent, un taux de génération g plus petit mène à une densité stationnaire plus faible et à un régime transitoire plus long.

En régime stationnaire, la courbe décrivant l'évolution dans le temps de la densité électronique pour une fréquence de 1 MHz n'étant pas une sinusoïde parfaite (voir figure 4.10), nous avons calculé sa transformée de Fourier discrète et en avons reporté le spectre fréquentiel sur la figure 4.12. Nous pouvons observer un doublement de la fréquence par rapport à la fréquence de perturbation. S'en suivent des harmoniques, dus à la forte non-linéarité du taux de génération puisque celui-ci augmente de façon exponentielle avec le champ électrique (voir paragraphe 3.3.2, page 113). Contrairement à la vitesse de dérive, la génération électronique décrit une fonction paire du champ électrique. En effet, la densité de porteurs générés dé-

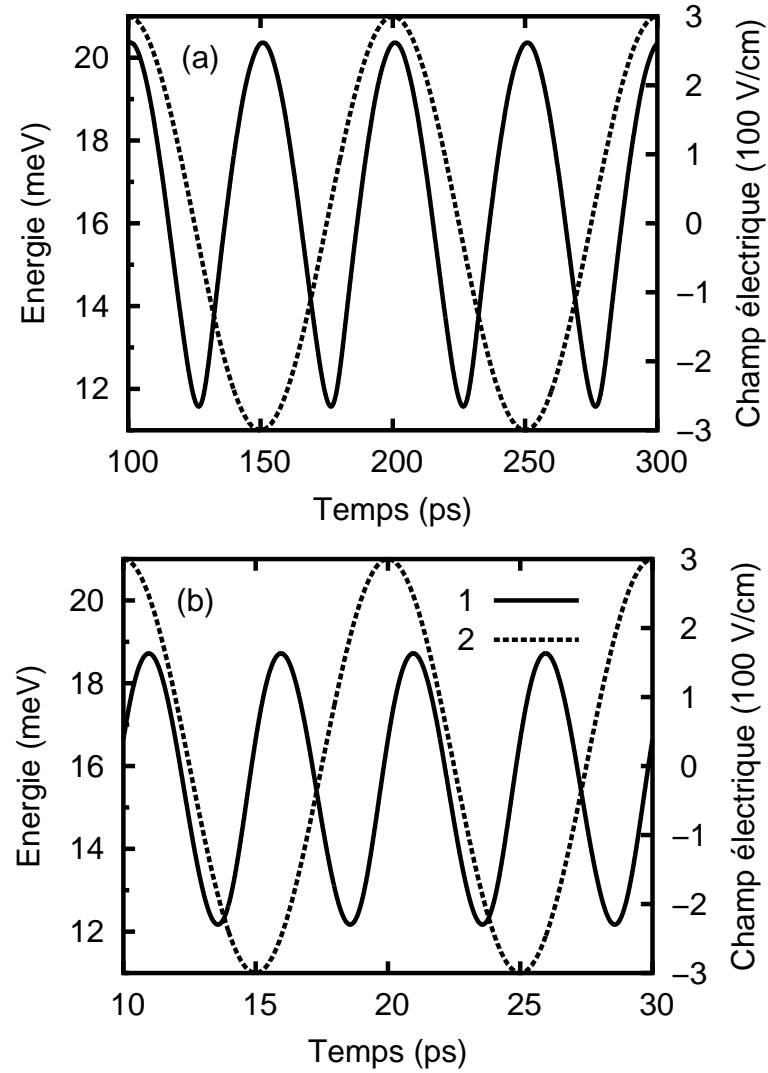


Figure 4.11 : Énergie moyenne électronique (1) et champ électrique (2) en fonction du temps pour une fréquence de 10 GHz (a) et de 100 GHz (b) et pour $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

pend uniquement de l'énergie des électrons et, de fait, elle n'est pas sensible à la direction du champ électrique mais uniquement à son module. La transformée de Fourier d'une fonction paire étant elle aussi paire, les harmoniques présents dans le spectre de la réponse de la densité électronique sont les multiples pairs de la fréquence de perturbation.

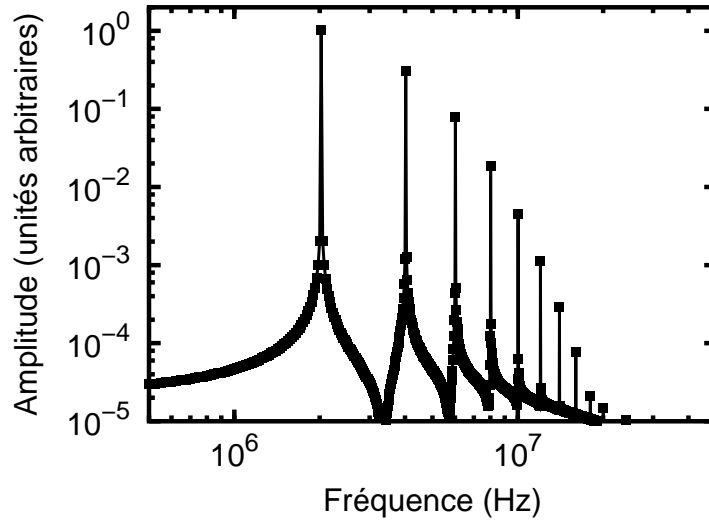


Figure 4.12 : Spectre fréquentiel de la réponse de la densité électronique $n(t)$ pour une perturbation harmonique grand-signal d'amplitude 300 V/cm et de fréquence $f = 1$ MHz, pour $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

Densité de courant

Les résultats obtenus pour l'évolution temporelle de la densité de courant $J(t)$ et pour des fréquences de 1, 10 et 100 MHz sont reportés sur les figures 4.13 et 4.14, pour une densité d'électrons à champ nul $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Comme dans le cas statique, lors de l'application d'un champ électrique grand-signal aux fréquences considérées, la vitesse électronique augmente et la densité de courant traverse une phase transitoire avant d'atteindre, au bout de quelques picosecondes, une première valeur (voir figure 4.13). Pour des durées plus importantes, la densité de courant oscille sous l'effet de la perturbation, comme le montre la figure 4.14. Le régime cyclostationnaire n'est cependant pas atteint immédiatement. Au contraire, on observe un régime transitoire durant lequel l'amplitude de la densité de courant augmente. Ce phénomène étant dû aux processus de génération et de recombinaison Auger, la durée du régime transitoire, soit environ $1 \mu\text{s}$, est la même que dans le cas de la densité électronique. L'amplitude de la densité de courant en l'absence de génération-recombinaison a été reportée en pointillés. Nous pouvons observer que les processus Auger induisent à eux seuls une augmentation d'un facteur $n_s/n_0 \simeq 3.6$ de la valeur maximale atteinte par la densité

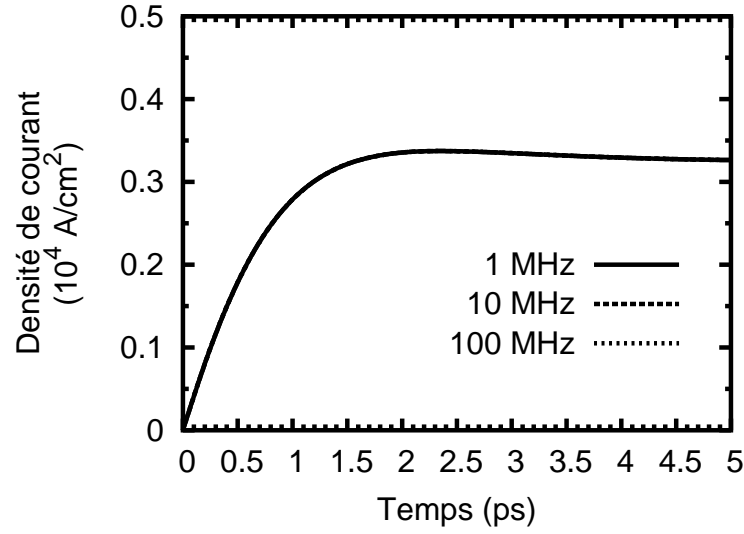


Figure 4.13 : Densité de courant en fonction du temps pour une durée de 5 ps, pour $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, et pour des fréquences de 1 MHz, 10 MHz et 100 MHz. Les trois courbes sont superposées.

de courant en régime cyclostationnaire.

Remarquons enfin que l'évolution de la densité de courant sous une perturbation de fréquence 1 MHz s'éloigne fortement de la sinusoïde du champ électrique. En effet, nous avons vu précédemment que pour cette fréquence la densité électronique oscille de façon importante, et l'étude de son spectre a révélé une forte non-linéarité à laquelle vient se superposer celle de la vitesse électronique. Le spectre fréquentiel de $J(t)$ en régime périodique, reporté sur la figure 4.15, révèle une fonction fortement non-linéaire et impaire, puisque l'on voit apparaître nombre d'harmoniques, dont les fréquences sont des multiples impairs de la fréquence de perturbation. En effet, étant le produit de la vitesse, qui est une fonction impaire du champ électrique, et du nombre, qui lui est une fonction paire, la densité de courant est une fonction impaire du champ électrique.

Cas du matériau polarisé

Regardons à présent ce qu'il se passe lorsque un signal harmonique d'amplitude modérée est appliqué au matériau déjà polarisé. Pour ce faire, nous considérons un signal composé

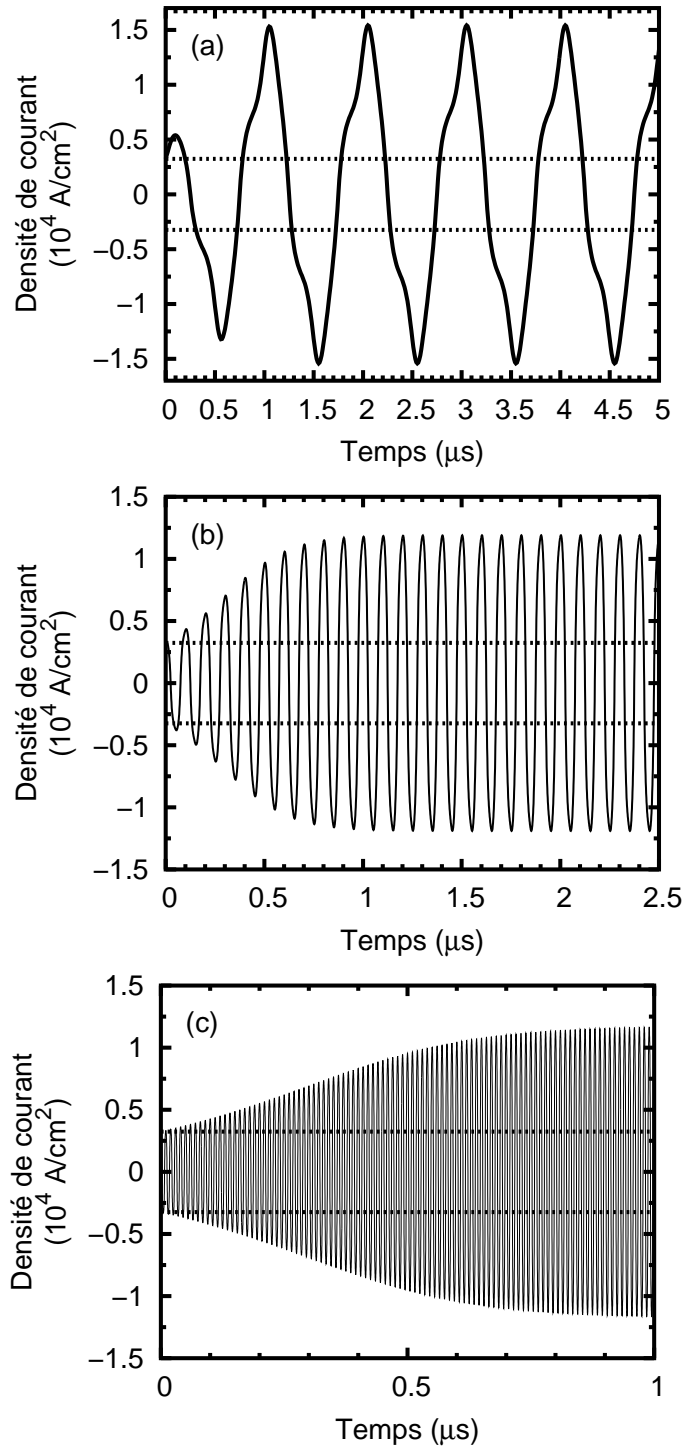


Figure 4.14 : Densité de courant en fonction du temps pour $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, pour des fréquences de 1 MHz (a), 10 MHz (b) et 100 MHz (c). Les courbes en pointillés représentent l'amplitude du courant en l'absence des processus de génération-recombinaison.

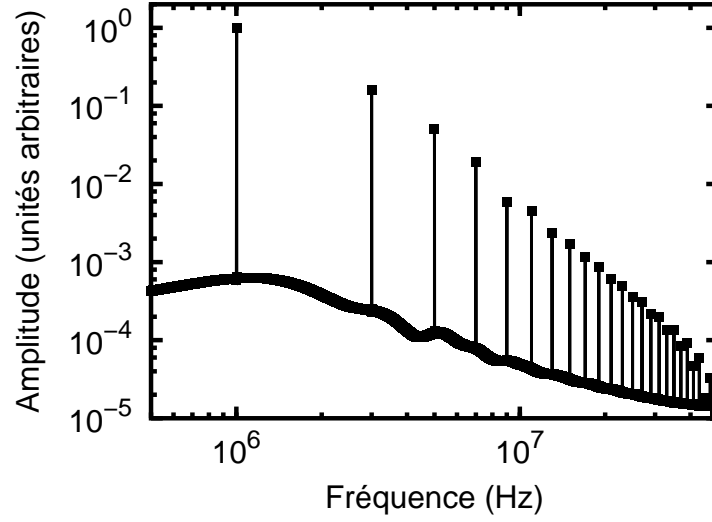


Figure 4.15 : Spectre fréquentiel de la densité de courant $J(t)$ en régime cyclo-stationnaire pour une perturbation harmonique grand-signal d'amplitude 300 V/cm, de fréquence 1 MHz, et pour $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

d'une partie statique non-nulle à laquelle est ajoutée une perturbation harmonique, de sorte que le champ électrique appliqué au matériau est de la forme :

$$E(t) = E_s + E_h \cos(2\pi ft) \quad (4.10)$$

où E_s et E_h correspondent respectivement à la composante statique et à l'amplitude du signal harmonique. La fréquence f est quant à elle prise égale à 1 GHz.

Comme le montre la figure 4.16, un échelon de champ électrique (courbe continue) et une perturbation harmonique (courbe en pointillés) d'amplitudes 50 V/cm n'ont tous deux que peu d'effets sur la densité électronique. Toutefois, lorsque un champ électrique règne déjà au sein du matériau, la même perturbation harmonique de 50 V/cm d'amplitude peut avoir des conséquences relativement importantes. C'est ce que montre la figure 4.17, sur laquelle nous pouvons remarquer que l'augmentation de la densité électronique due à la présence de cette perturbation est plus importante lorsque la composante continue est plus élevée. De fait, des perturbations de puissances relativement faibles ont des effets d'autant plus importants que les matériaux sur lesquels elles sont appliquées sont polarisés fortement. Bien sûr, à

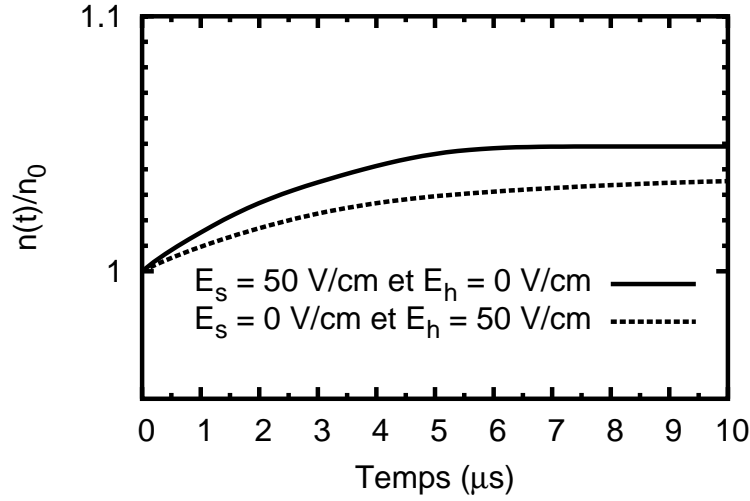


Figure 4.16 : Densité électronique normalisée à $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ en fonction du temps pour un échelon de 50 V/cm (courbe continue) et pour une perturbation harmonique de 50 V/cm d'amplitude (courbe en pointillés).

polarisation égale, une perturbation de plus grande amplitude a des effets plus importants sur la densité électronique, comme le montre la figure 4.18.

4.2.2 Impulsions

Nous avons vu, dans le paragraphe précédent, que le transport électronique dans le MCT pouvait être fortement perturbé en présence d'un champ électrique sinusoïdal de forte amplitude. En pratique, les perturbations de fortes amplitudes étant généralement observées pendant des temps très courts, nous nous intéressons aux effets d'une impulsion sur le matériau. Pour cela, nous étudions la réponse de la densité électronique à une impulsion rectangulaire d'amplitude 300 V/cm. Nous considérons la composante continue du champ électrique comme nulle, et la densité électronique initiale est prise égale à $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Les résultats obtenus pour des durées d'impulsion de 10 ns, 100 ns, 250 ns, 600 ns et 1 μs sont reportés sur la figure 4.19. L'impulsion est appliquée à l'instant $t = 0$.

Pour les cas considérés, nous remarquons que l'allure de la densité électronique varie avec la durée d'impulsion. En effet, à cause des temps caractéristiques des processus d'ionisation

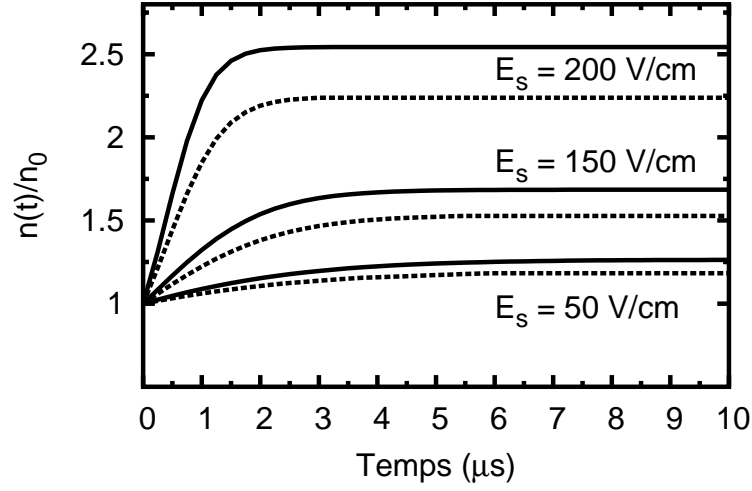


Figure 4.17 : Densité électronique normalisée à $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ en fonction du temps pour différentes valeurs de la composante continue E_s , pour $E_h = 0 \text{ V/cm}$ (courbes en pointillés) et pour $E_h = 50 \text{ V/cm}$ (courbes en traits pleins).

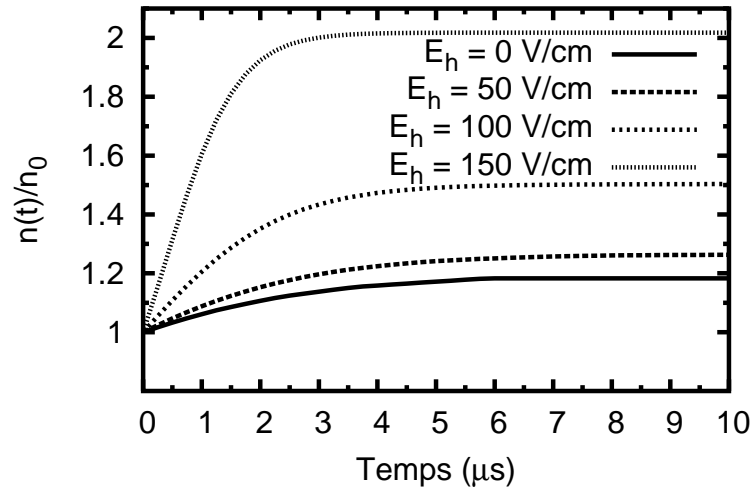


Figure 4.18 : Densité électronique normalisée à $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ en fonction du temps pour $E_s = 100 \text{ V/cm}$, et pour différentes valeurs de E_h .

par impact (de l'ordre d'un dixième de microseconde), la densité électronique atteinte à la fin de l'impulsion varie suivant la durée de celle-ci. Pour les trois impulsions les plus courtes (10, 100 et 250 ns), la densité électronique n'a pas le temps d'atteindre sa valeur stationnaire

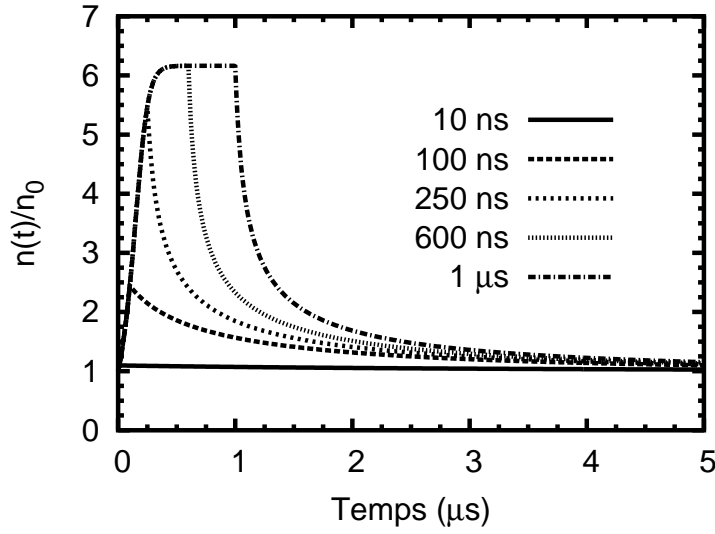


Figure 4.19 : Évolution dans le temps de la densité électronique normalisée à $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ sous l'effet d'une impulsion de 300 V/cm, pour des durées d'impulsions de 10 ns, 100 ns, 250 ns, 600 ns et de 1 μs .

et l'on peut observer que l'impulsion de 10 ns n'engendre qu'une faible génération électronique. Le régime stationnaire est cependant atteint pour les deux impulsions les plus longues puisque, dans ces deux cas, les processus de génération et de recombinaison s'équilibrent et la densité électronique atteint un plateau avant de décroître. Remarquons qu'en dépit de durées d'impulsions différentes, la décroissance de la densité électronique est identique après une impulsion de 600 ns et après une impulsion de 1 μs . Néanmoins, pour des durées plus courtes, nous pouvons observer une décroissance qui est d'autant moins abrupte que l'impulsion est brève. En fait, la décroissance de la densité électronique, due à la recombinaison Auger, n'est pas directement fonction de la durée d'impulsion mais de la densité électronique elle-même. Les processus de recombinaison étant d'autant plus nombreux que la densité d'électrons est grande, la durée de vie des porteurs est plus courte dans le cas des dopages élevés. Nous pouvons enfin souligner le fait que la durée nécessaire pour que la densité électronique revienne à sa valeur initiale est relativement longue puisque de l'ordre de la microseconde.

Échauffement du matériau

Intéressons-nous à présent au comportement thermique du matériau et évaluons l'élévation

de la température du réseau sous l'effet d'une impulsion continue de $1 \mu\text{s}$ de durée et de 300 V/cm d'amplitude. Dans ce cas, la puissance P_s traversant le semiconducteur vérifie la relation :

$$P_s = \frac{Q}{t} = R_s I^2 \quad (4.11)$$

où R_s est la résistance du semiconducteur et t la durée pendant laquelle est appliquée l'impulsion. La quantité de chaleur Q est quant à elle donnée par l'expression :

$$Q = 4.18 \mathcal{C} \Delta T \quad (4.12)$$

où \mathcal{C} est la capacité calorifique du matériau et ΔT l'élévation de température. Pour une durée d'une microseconde, il vient que :

$$\Delta T = 10^{-6} \frac{q n \mu E^2}{4.18 \rho \mathcal{C}} \quad (4.13)$$

où ρ est la masse volumique. En prenant $\mathcal{C} \simeq 50 \text{ cal/kg.K}$ et $E = 300 \text{ V/cm}$, l'échauffement du matériau pendant l'impulsion est évalué à environ 0.15 K . De fait, dans le cas du matériau, l'élévation de température sous l'effet d'impulsions longues n'est pas négligeable. Remarquons toutefois que dans le cas d'un composant la présence d'un substrat limite l'échauffement.

4.2.3 Trains d'impulsions

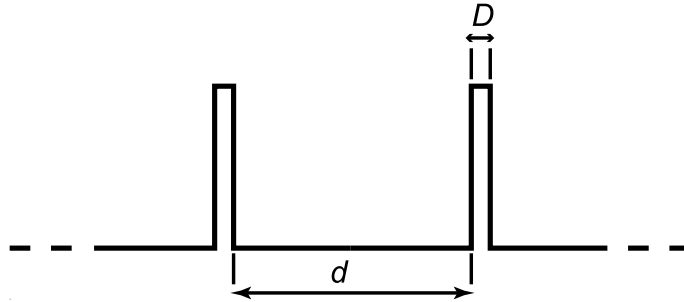


Figure 4.20 : Schéma d'un train d'impulsions appliqué au matériau semiconducteur, où D est la durée d'impulsion et d la durée séparant deux impulsions successives.

Nous venons de voir qu'une seule impulsion est en mesure de perturber fortement la densité électronique, à condition que son amplitude soit suffisamment grande et sa durée suffisamment longue. Ainsi, nous avons pu remarquer qu'une impulsion ne durant que 10 ns n'engendre qu'une faible génération électronique. D'un autre côté, nous avons mis en évidence la longue décroissance la densité électronique suite à la perturbation du système par une impulsion. Celle-ci étant de l'ordre de la microseconde, il est intéressant de regarder ce qu'il se passe lorsque plusieurs impulsions sont appliquées de façon successive au matériau, et ce afin de mettre en évidence un éventuel effet d'accumulation. À ce titre, nous avons étudié la réponse de la densité électronique à un train d'impulsions, dont le schéma est donné dans la figure 4.20.

Influence de la durée d séparant deux impulsions

Nous fixons dans un premier temps la durée de chaque impulsion à $D = 10$ ns et l'amplitude à 300 V/cm. Nous avons reporté sur la figure 4.21 les résultats obtenus pour des valeurs de d égales à 50, 100 et 200 ns et pour une densité électronique initiale $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$.

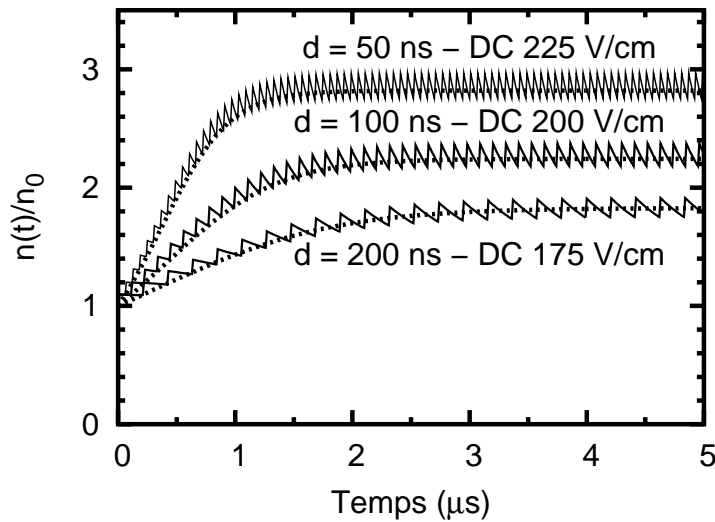


Figure 4.21 : Densité électronique normalisée à $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ en fonction du temps sous l'effet d'un train d'impulsions de durées 10 ns et pour différents délais de répétition d . Les résultats du régime impulsionnel (courbes en traits pleins) sont comparés à ceux du régime statique (courbes en pointillés).

Nous pouvons remarquer que, alors qu'une seule impulsion de 10 ns n'avait que peu d'effets

sur la densité électronique, la répétition de celle-ci dans des délais relativement brefs provoque une augmentation conséquente de la densité de porteurs. En effet, le temps de recombinaison étant plus important que le délais de répétition, la densité d'électrons n'a pas le temps de se relaxer totalement entre deux impulsions et l'on observe un effet d'accumulation responsable de l'augmentation de la densité d'électrons libres. Cette augmentation ne se fait pas de façon monotone, et l'on peut observer que les différentes courbes de $n(t)$ sont dentelées. En effet, durant l'impulsion, les processus de génération sont favorisés alors que ce sont les effets de la recombinaison qui sont prépondérants lorsque le champ appliqué est nul. De fait, l'augmentation de la densité de porteurs est plus importante lorsque la recombinaison est favorisée moins longtemps, c'est à dire lorsque les valeurs de d sont plus petites. À titre de comparaison, nous avons reporté sur la figure 4.21 des résultats statiques correspondant à peu près aux mêmes profils temporels de densités électroniques (courbes en pointillés). Nous pouvons remarquer que les effets d'un train d'impulsions de durées 10 ns et de 300 V/cm d'amplitude sont équivalents à ceux engendrés par un échelon de champ électrique de 175 V/cm lorsque $d = 200$ ns, de 200 V/cm lorsque $d = 100$ ns, et de 225 V/cm lorsque $d = 50$ ns.

Remarquons enfin que, les processus de recombinaison étant plus actifs quand les densités électroniques sont plus élevées, le régime transitoire est plus court lorsque la durée séparant deux impulsions successives est plus faible. En effet, nous pouvons observer que le régime périodique est atteint au bout d'environ 4 μ s pour $d = 200$ ns (soit environ 20 impulsions), de 3 μ s pour $d = 100$ ns (soit environ 25 impulsions) et au bout de 2 μ s pour $d = 50$ ns (soit environ 30 impulsions).

Influence de la durée d'impulsion D

Ayant mis précédemment en évidence les effets de la durée d séparant deux impulsions successives, nous fixons à présent cette dernière à 100 ns et évaluons l'influence de la durée d'impulsion D sur la densité électronique. Les résultats obtenus pour des durées valeurs de D égales à 10, 20 et 100 ns sont reportés sur la figure 4.22.

Comme précédemment, nous pouvons observer une augmentation de la densité électronique

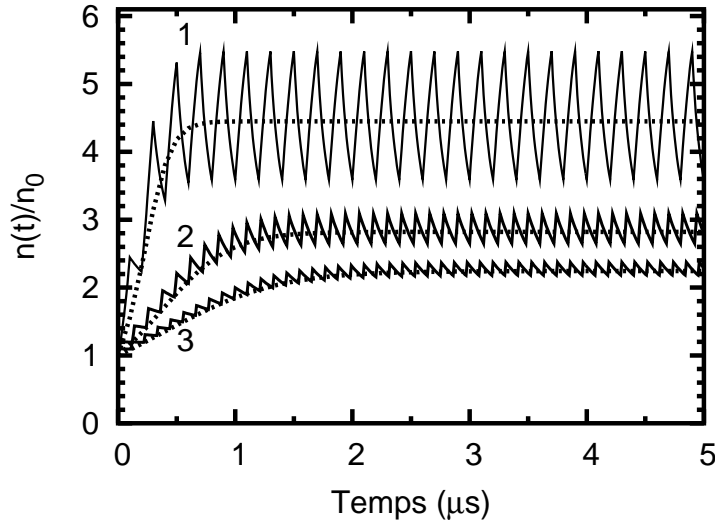


Figure 4.22 : Densité électronique normalisée à $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ en fonction du temps sous l'effet d'un train d'impulsions, pour un délais de répétition de 100 ns et des durées d'impulsion D égales à 100 ns (1), 20 ns (2), et 10 ns (3). Les résultats du régime impulsionnel (courbes en traits pleins) sont comparés à ceux du régime statique (courbes en pointillés) pour des échelons de champ électrique de 270 V/cm (1), 225 V/cm (2) et 200 V/cm (3).

dans le temps, due à un effet d'accumulation. Les durées d'impulsions plus grandes favorisant les processus de génération, nous observons une augmentation plus importante de la densité électronique et une durée du transitoire plus courte pour les valeurs de d les plus grandes. À titre de comparaison, nous avons reporté sur la figure 4.22 des résultats statiques (courbes en pointillés) pour lesquels les profils temporels de la densité électronique sont comparables à ceux obtenus ici. Nous pouvons remarquer que les effets d'un train d'impulsions de délais de répétition 100 ns et de 300 V/cm d'amplitude sont à peu près équivalents à ceux engendrés par un échelon de 200 V/cm lorsque la durée d'impulsion vaut $D = 10$ ns, et de 225 V/cm lorsque $D = 20$ ns. Les valeurs obtenues pour $D = 100$ ns oscillent fortement autour du profil correspondant à un échelon de 270 V/cm. Remarquons enfin que le régime périodique est atteint pour des durées de 3 μs lorsque $D = 10$ ns (soit environ 25 impulsions), de 2 μs lorsque $D = 20$ ns (soit environ 15 impulsions) et de 1 μs lorsque $D = 100$ ns (soit 5 impulsions).

4.2.4 Impulsions hyperfréquence

Si une impulsion peut être appliquée en tant que telle aux bornes d'un dispositif à l'aide d'un générateur, elle ne peut se propager dans l'atmosphère que sous la forme d'une onde électromagnétique, c'est à dire en étant associée à une fréquence porteuse. Dans le cadre de notre étude sur les effets des micro-ondes sur le comportement électronique du MCT, l'évaluation des effets d'une impulsion hyperfréquence sur la densité électronique est par conséquent une étape importante. Nous avons considéré une telle perturbation en choisissant une durée de $1\ \mu\text{s}$ et une amplitude de $300\ \text{V/cm}$. Les résultats obtenus pour différentes valeurs de f sont reportés sur la figure 4.23.

Nous pouvons remarquer que la densité électronique augmente durant l'application du signal harmonique, sans atteindre le régime périodique, avant de décroître lorsque le champ s'annule. En ce qui concerne la phase de croissance, les résultats obtenus sont en tout point similaires à ceux du cas harmonique, étudié à la section 4.2.1, pour des durées de perturbation en deçà de la microseconde.

Nous pouvons remarquer que l'augmentation de la densité électronique est moindre dans le cas d'une impulsion hyperfréquence que dans celui d'une impulsion continue de même amplitude et de même durée. En effet, pour des fréquences comprises entre $100\ \text{MHz}$ et $10\ \text{GHz}$, l'évolution de la densité est comparable aux résultats obtenus dans le cas d'une perturbation par une impulsion continue de $1\ \mu\text{s}$ de durée et de $250\ \text{V/cm}$ d'amplitude. Remarquons que, comme dans le cas harmonique, les résultats obtenus pour des fréquences de $100\ \text{MHz}$, $1\ \text{GHz}$ et $10\ \text{GHz}$ sont confondus. À $100\ \text{GHz}$, la dynamique des porteurs n'est plus en phase avec le champ électrique et les résultats doivent être comparés avec les effets d'une impulsion rectangulaire de $210\ \text{V/cm}$ d'amplitude, soulignant le fait qu'une fréquence porteuse très importante limite les effets de la perturbation sur la densité électronique.

Remarquons qu'à l'instar du cas continu, le temps nécessaire à la relaxation de la densité électronique est important, tout du moins supérieur à la microseconde.

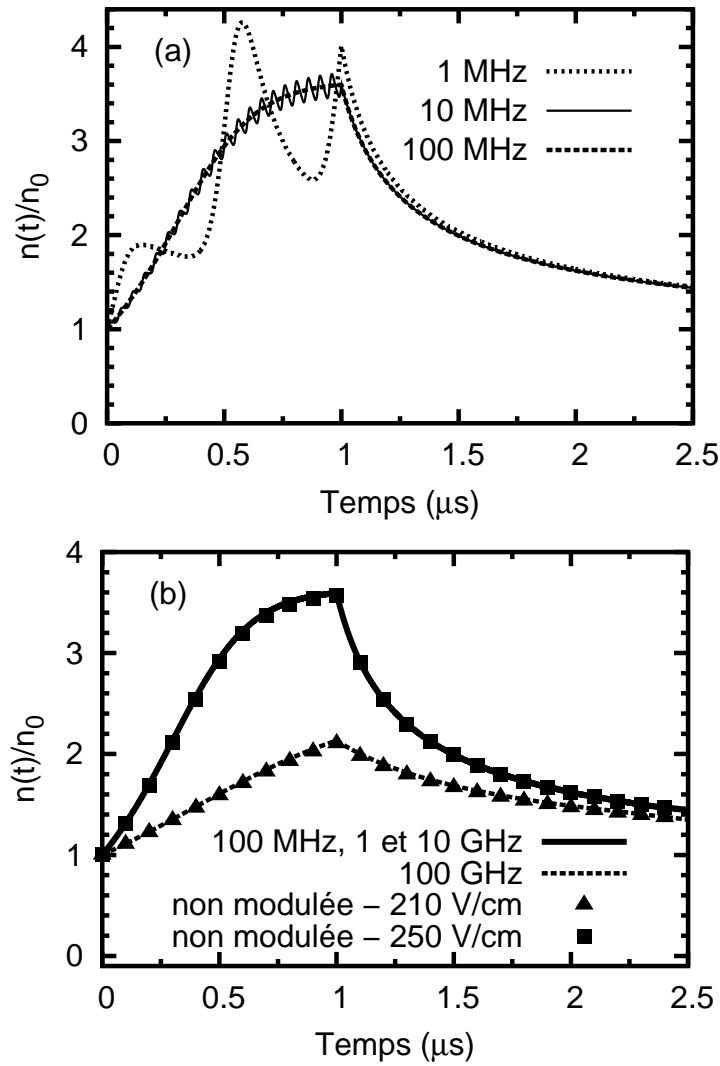


Figure 4.23 : Densité électronique normalisée à $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ en fonction du temps sous l'effet d'une impulsion d'amplitude 300 V/cm et de 1 μs de durée, pour différentes valeurs de la fréquence porteuse (courbes) et sous l'effet d'un échelon de champ électrique de 210 V/cm (symboles triangles) et de 250 V/cm (symboles carrés).

4.2.5 Trains d'impulsions hyperfréquence

Nous avons pu remarquer que, bien que la présence d'une fréquence porteuse diminue les effets de l'impulsion sur la génération électronique, le temps de relaxation de la densité d'électrons reste important. Ceci laisse attendre ici aussi les effets d'accumulation de la densité électronique que nous avons mis en évidence lors de l'application d'un train d'im-

pulsions rectangulaires. Nous abordons alors l'étude de la réponse électronique du matériau à un train d'impulsions hyperfréquence de grande amplitude. Un schéma de la perturbation considérée est donné dans le figure 4.24. Nous fixons l'amplitude à 300 V/cm et le dopage à $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. Des fréquences porteuses de 1 GHz et de 10 GHz sont considérées.

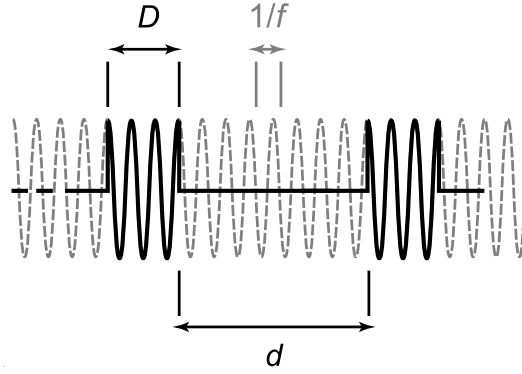


Figure 4.24 : Schéma d'un train d'impulsions de durées D , de délais de répétition d et de fréquence porteuse f .

Influence de la durée d séparant deux impulsions hyperfréquence

Nous fixons dans un premier temps la durée d'impulsion à $D = 10 \text{ ns}$. Les résultats obtenus pour différentes valeurs de d sont reportés sur la figure 4.25. Nous pouvons remarquer que la densité électronique évolue de façon similaire pour les deux fréquences porteuses considérées, ces dernières n'agissant pas de manière significative sur la réponse de la densité de porteurs à chaque impulsion, comme nous l'avons vu dans lors de l'étude de l'impulsion hyperfréquence. Les résultats obtenus pour des délais de répétition de 10, 50 et 200 ns (reportés sous forme de courbes) sont similaires à ceux correspondant à l'application d'échelons de champ électrique d'amplitudes 177, 150 et 120 V/cm respectivement (reportés sous forme de symboles). De fait, à durées et délais de répétition égaux, l'augmentation de la densité électronique est plus faible dans le cas d'un train d'impulsions hyperfréquence que dans celui d'un train d'impulsions continues. Par conséquent, la présence d'une fréquence porteuse atténue les effets de la perturbation.

Enfin, nous pouvons observer que, comme dans le cas du train d'impulsions continues, un délais de répétition plus court engendre une augmentation de la densité électronique plus

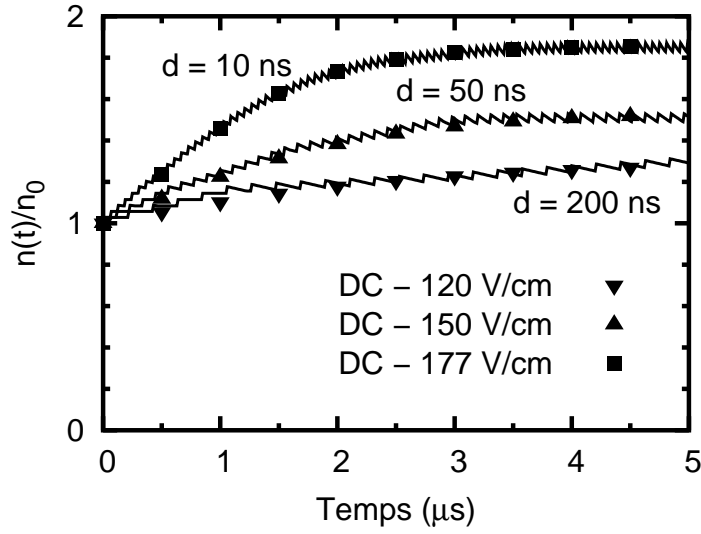


Figure 4.25 : Densité électronique normalisée à $n_0 = 5.4 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ en fonction du temps sous l'effet d'un train d'impulsions de durées 10 ns, pour différentes valeurs de la durée d séparant deux impulsions successives (courbes) et sous l'effet d'un échelon de champ électrique pour différentes amplitudes (symboles). Les résultats sont confondus pour une fréquence porteuse $f = 1 \text{ GHz}$ et pour $f = 10 \text{ GHz}$.

importante.

Influence de la durée d'impulsion D

Nous fixons à présent le temps séparant deux impulsions successives à $d = 100 \text{ ns}$. Les résultats correspondant à des durées d'impulsions de 10, 20 et 100 ns sont reportés sous forme de courbes sur la figure 4.26, et nous pouvons remarquer qu'ils sont similaires à ceux obtenus pour des échelons de champ électrique d'amplitudes 150, 177 et 222 V/cm respectivement (reportés sous forme de symboles). Une fois de plus, nous vérifions l'atténuation des effets de la perturbation sur la densité électronique du fait de la présence d'une fréquence porteuse.

Enfin, à l'image de ce que nous avons vu dans le paragraphe 4.2.3, une durée d'impulsions D plus grande implique une augmentation de la densité électronique plus importante.

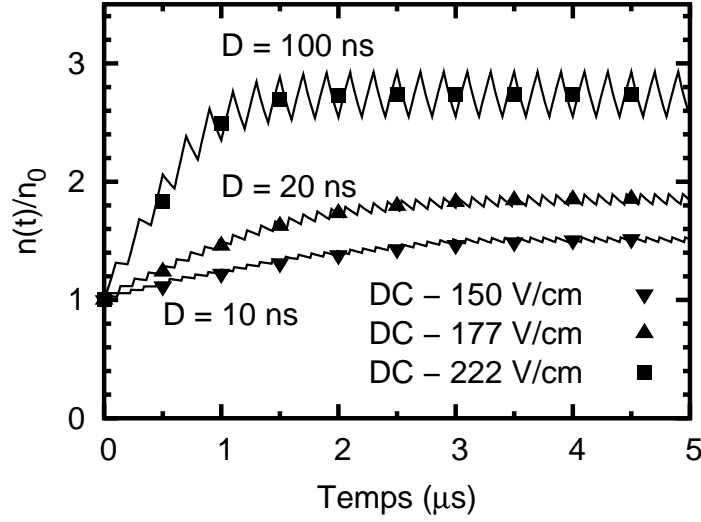


Figure 4.26 : Densité électronique normalisée en fonction du temps sous l'effet d'un train d'impulsions de délais de répétition 100 ns, pour différentes durées d'impulsions D (courbes) et sous l'effet d'un échelon de champ électrique, pour différentes amplitudes (symboles). Les résultats sont confondus pour une fréquence de modulation $f = 1$ GHz et $f = 10$ GHz.

Conclusion

Tout au long de ce chapitre, nous avons mené une étude du comportement électronique du MCT en régime dynamique, afin d'évaluer les effets engendrés par un champ électrique hyperfréquence. Dans un premier temps, nous nous sommes intéressés au régime petit-signal. L'analyse de celui-ci a été faite après que nous ayons développé une méthode, basée sur la théorie de la réponse linéaire ainsi que sur la linéarisation des équations hydrodynamiques, permettant d'exprimer la mobilité différentielle en fréquence sous une forme analytique en même temps que d'extraire les taux de relaxation généralisés et la fonction de réponse du système. En effet, les informations ainsi obtenues permettent de décrire le comportement hyperfréquence du matériau et de relier celui-ci à la dynamique des porteurs de charges. Dans le cas du MCT, nous avons montré que la relaxation de la vitesse et celle de l'énergie sont couplées pour des champs électriques supérieurs à 50 V/cm. Ceci révèle un ordonnancement de la dynamique électronique, qui correspond ici à un cycle répété d'accélérations des électrons et d'émissions de phonons optiques polaires. Celui-ci induit une contribution oscillatoire dans le

temps de la fonction de réponse, associée à un amortissement qui dans le cas du MCT est très important. De fait, nous avons observé une légère augmentation de la mobilité différentielle à forts champs électriques, due à cette contribution oscillatoire, lorsque la fréquence de perturbation se rapproche de la fréquence de coupure. Enfin, nous avons mis en évidence une chute de la mobilité différentielle au delà de 100 GHz, du fait du déphasage entre la dynamique des porteurs de charges et le champ électrique. Remarquons que les résultats ainsi obtenus présentent un excellent accord avec ceux de notre simulateur hydrodynamique.

Nous avons, dans un second temps, évalué les effets sur le comportement électronique du MCT d'un champ électrique pouvant être induit par une onde hyperfréquence de forte puissance. À ce titre, une étude hydrodynamique des paramètres de transport en régime grand-signal a été menée en considérant plusieurs formes d'ondes. Durant l'étude du régime harmonique, une analyse fréquentielle de la vitesse de dérive, de la densité électronique et de la densité de courant a montré la présence d'harmoniques d'ordres supérieurs dans les spectres de réponse de ces grandeurs, mettant ainsi en évidence leurs fortes non-linéarités. Par la suite, une attention plus particulière a été prêtée à l'évolution temporelle de la densité électronique. Si celle-ci augmente dans le temps sous l'effet d'une perturbation harmonique, nous avons vu qu'elle présente des oscillations dues à la variation du taux de génération, inhérente à celle du champ électrique. Toutefois, ces oscillations disparaissent autour de 100 MHz, lorsque la période du champ électrique devient inférieure au temps caractéristique des processus de génération. L'évolution de la densité électronique devient alors indépendante de la fréquence jusqu'à environ 100 GHz où les effets du champ électrique sont amoindris du fait du déphasage entre celui-ci et la réponse des porteurs de charges.

De plus, nous avons montré qu'un matériau dans lequel règne déjà un champ électrique de polarisation est plus sensible aux perturbations de faibles puissances.

L'analyse de la réponse du système à une impulsion rectangulaire nous a permis d'observer que la densité électronique atteinte à la fin de l'impulsion commence à augmenter avec la durée de celle-ci. Toutefois, elle atteint une valeur stationnaire dès lors que les processus de

recombinaison équilibrent la génération de porteurs. De plus, nous avons pu remarquer que le temps nécessaire à la relaxation de la densité électronique est relativement long, puisque de l'ordre de la microseconde. Ainsi, la répétition de l'impulsion dans des intervalles de temps de l'ordre de la dizaine à la centaine de nanosecondes induit un effet d'accumulation de la densité électronique. En étudiant la réponse du système à un train d'impulsions, nous avons montré que les effets de ce dernier s'avèrent plus importants lorsque la génération est favorisée et les processus de recombinaison limités par le temps, c'est à dire lorsque la durée d'impulsion est plus longue et le délais de répétition plus court.

Enfin, en remarquant que la propagation dans l'atmosphère d'une impulsion, pouvant par exemple être émise par un radar, n'est possible que lorsque celle-ci est associée à une fréquence porteuse, nous avons étudié le cas des impulsions hyperfréquence. Nous avons montré que les effets d'une impulsion ou d'un train d'impulsions sur la densité électronique du MCT sont moins importants lorsque les perturbations sont associées à une fréquence porteuse que lorsqu'elles sont rectangulaires. De plus, nous avons retrouvé, dans le cas de l'impulsion hyperfréquence, le comportement fréquentiel mis en évidence dans le cas harmonique. Ainsi, nous avons pu remarquer que, si des fréquences de 100 MHz à 10 GHz engendrent la même évolution de la densité électronique, les effets de la perturbations sont plus faibles pour une porteuse de 100 GHz.

Conclusion générale

Nous avons étudié les effets d'une onde hyperfréquence de forte puissance sur le comportement électronique du $\text{Hg}_{0.795}\text{Cd}_{0.205}\text{Te}$. Cet alliage semiconducteur de type II-VI est très utilisé dans le domaine de la photodétection infrarouge et plus particulièrement dans la fenêtre atmosphérique LWIR (Long Wavelength InfraRed), concernant les longueurs d'ondes comprises entre 8 et 14 μm , et présentant un intérêt fondamental pour les applications de vision nocturne. Pour mener à bien ce travail, nous avons mis en place un modèle théorique, basé sur les approches Monte Carlo et hydrodynamique, et permettant de simuler le transport de charges dans ce matériau, tant en régime statique que dynamique.

Si les paramètres cristallographiques et un certain nombre d'informations concernant la structure énergétique du MCT sont accessibles, la majorité des données nécessaires à la mise en oeuvre d'un simulateur macroscopique sont absentes de la littérature. Or, l'approche hydrodynamique s'avère la plus adéquate à la modélisation des phénomènes de génération-recombinaison qui jouent un rôle très important dans le matériau d'intérêt. L'un des points importants de ce travail a par conséquent consisté en l'extraction des paramètres nécessaires à la mise en oeuvre d'un tel modèle à l'aide d'un simulateur Monte Carlo. Les valeurs stationnaires de la vitesse de dérive, de l'énergie moyenne et de la masse effective moyenne ont de fait été calculées en fonction du champ électrique. En même temps, l'évolution de la mobilité électronique avec le champ électrique a été décrite et une étude du bruit nous a permis d'extraire, entre autres, le coefficient de diffusion. De plus, nous avons déterminé à l'aide de données expérimentales les valeurs du taux de génération Auger, que de nouvelles mesures permettraient d'affiner.

L'étude du comportement du matériau en régime statique a mis en évidence l'apparition du régime de porteurs chauds pour des champs électriques relativement faibles, puisque d'environ 50 V/cm. L'augmentation de l'énergie électronique moyenne qui en résulte, associée à une forte mobilité et au petit gap du matériau, enclenche les processus d'ionisation par impact menant à une augmentation de la densité électronique et par là-même de courant pour des champs électriques de l'ordre de 100 V/cm. À travers l'analyse de la réponse transitoire de la dynamique électronique, nous avons montré que la durée nécessaire pour que la vitesse et l'énergie des électrons atteignent leurs valeurs stationnaires est de l'ordre de la picoseconde, soulignant ainsi un premier temps caractéristique du transport de charges dans le MCT, relatif aux différents mécanismes de collision. L'évolution de la densité électronique en réponse à un échelon de champ électrique a elle aussi été décrite et nous avons pu souligner son augmentation dans le temps. Qui plus est, si les effets de la recombinaison peuvent être négligés pour des durées de transport de l'ordre de 50 ns, celle-ci finit par équilibrer les effets de l'ionisation par impact pour mettre en place un régime stationnaire. Un second temps caractéristique du comportement électronique du matériau, de l'ordre d'un dixième de microseconde, a ainsi pu être associé aux processus de génération-recombinaison. En ce qui concerne la densité électronique atteinte en régime stationnaire, nous avons montré qu'elle est d'autant plus élevée que l'amplitude de l'échelon de champ électrique est importante. En la comparant à la densité de porteurs à champ nul, nous avons pu évaluer la multiplication électronique et montrer que celle-ci pouvait varier fortement suivant le dopage et le champ électrique. En effet, les processus de recombinaison Auger étant moins actifs pour les concentrations électroniques les moins élevées, celle-ci est d'autant plus grande que le dopage est faible. Nous avons de plus remarqué que, si la multiplication de la densité électronique peut atteindre des valeurs importantes pour des champs électriques suffisamment élevés, elle est très inférieure à celle de la densité de trous minoritaires.

Dans le but d'évaluer les effets d'un champ électrique pouvant être induit au sein du matériau par une onde hyperfréquence incidente, nous avons étudié le régime dynamique. Nous avons tout d'abord utilisé un modèle semi-analytique basé sur les équations hydrodynamiques

qui nous a permis de décrire la réponse petit-signal du matériau ainsi que de calculer les taux de relaxation généralisés. L'étude a mis en évidence l'activation, dès lors que le transport électronique se fait en régime de porteurs chauds, d'un cycle répété d'accélération des électrons et d'émissions de phonons optiques polaires. Cette dynamique ordonnée des porteurs de charges induit, pour les forts champs électriques, une légère augmentation de la mobilité différentielle lorsque la fréquence de perturbation se rapproche de la fréquence de coupure. La chute de la mobilité différentielle au delà de 100 GHz est quant à elle due au déphasage entre la dynamique des porteurs de charges et le champ électrique.

Le régime grand-signal a par la suite été abordé en modélisant la réponse du gaz électronique à un signal de forte amplitude et en considérant plusieurs formes d'ondes. L'étude du régime harmonique a mis en évidence la non-linéarité de la réponse de la vitesse de dérive et de celle de la densité électronique pour des fréquences de l'ordre du MégaHertz. De plus, nous avons montré que l'évolution temporelle de la densité électronique dépend de la fréquence de la perturbation. En effet, pour des fréquences inférieures à 100 MHz, l'augmentation de la densité électronique s'accompagne d'oscillations à la fréquence double de celle du champ électrique. L'amplitude de ces oscillations diminue avec la fréquence jusqu'à disparaître autour de 100 MHz. La densité de porteurs évolue alors indépendamment de la fréquence de perturbation jusqu'à ce que cette dernière atteigne 100 GHz et que les effets du champ électrique sur la densité électronique soient amoindris.

L'étude de la réponse du matériau à une impulsion nous a permis de mettre en évidence une relaxation relativement lente de la densité électronique, associée à un temps de recombinaison de l'ordre de la microseconde. Répétées dans des délais adéquats, les impulsions sont alors en mesure de créer un effet d'accumulation et, par conséquent, de faire augmenter la densité électronique. En effet, nous avons montré qu'un train d'impulsions d'amplitude donnée pouvait avoir une influence sur l'évolution de la densité électronique comparable à celle qu'aurait un échelon de champ électrique d'amplitude plus faible. Qui plus est, nous avons pu remarquer que des délais de répétition plus courts et des durées d'impulsions plus grandes mènent à une multiplication plus importante de la densité de porteurs libres. Enfin,

si l'association des impulsions à une fréquence porteuse est nécessaire à leur propagation, elle tend à diminuer leurs effets sur la densité électronique.

Nous concluons en remarquant qu'une évaluation de l'influence des hyperfréquences sur le comportement électronique des composants photodétecteurs à base de $\text{Hg}_{0.795}\text{Cd}_{0.205}\text{Te}$ constitue une perspective intéressante à ce travail. Dans le but de permettre une telle étude à travers la modélisation du transport de charges dans un composant à base de MCT, nous avons pris soin d'extraire et d'exprimer sous forme analytique l'ensemble des paramètres nécessaires à la mise en place de modèles macroscopiques tels que ceux que nous avons utilisés dans ce travail. En effet, aussi précise et complète puisse-t-elle être, une description du comportement du matériau ne saurait être extrapolée de façon triviale à celle d'un dispositif. Cela est d'autant plus vrai dans notre cas, où les processus de génération-recombinaison jouent un rôle important. Du fait des grandes durées de temps qui leurs sont associées, la géométrie de la zone active est déterminante pour la multiplication électronique. De plus, suivant la distribution spatiale et la nature des dopants, le champ électrique peut atteindre localement des valeurs élevées, de nature à favoriser les phénomènes d'ionisation par impact et, par là-même, à faire augmenter le courant traversant le dispositif. Enfin, les processus de génération Auger donnant naissance à autant d'électrons que de trous, la densité de ces-derniers ne peut plus être négligée dès lors que l'ionisation par impact est activée. Leur mobilité restant toutefois très inférieure à celle des électrons, on peut s'attendre à voir apparaître au sein d'un composant des accumulations de charges positives en mesure de perturber la distribution du champ électrique et, par conséquent, le comportement électronique du dispositif.

Annexe A

Méthodes de tirage au sort de nombres aléatoires selon une distribution de probabilité

Sommaire

A.1 La méthode directe	179
A.2 La méthode du rejet ou de von Neumann	181

A.1 La méthode directe

Supposons que l'on veuille tirer au sort un nombre x_r , contenu dans un intervalle $[a, b]$, selon la distribution de probabilités $d(x)$. Appelons r le nombre aléatoire tiré au sort de façon équiprobable dans l'intervalle $[0, 1]$. Si l'on définit la fonction de répartition des probabilités $D(x_r)$ telle que :

$$D(x_r) = \text{Prob}(x \leq x_r) \tag{A.1}$$

celle-ci s'écrit :

$$D(x_r) = \int_a^{x_r} d(x)dx \tag{A.2}$$

Posons à présent :

$$D(x_r) = r \quad (\text{A.3})$$

Nous allons alors montrer, en nous aidant de la figure A.1, que le nombre x_r que nous obtiendrons en tirant au sort r sera distribué selon $d(x)$. En effet, on déduit de la relation

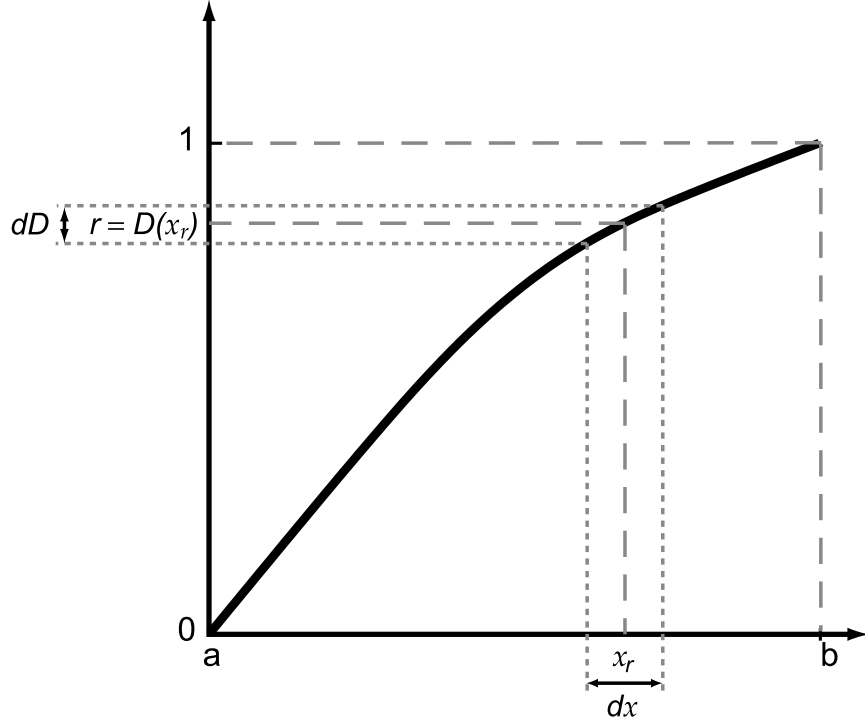


Figure A.1 : Tirage au sort d'un nombre aléatoire selon une distribution donnée.

(A.2) que

$$dD = d(x)dx \quad (\text{A.4})$$

où dD représente la probabilité pour que r appartienne à l'intervalle dD , et $d(x)dx$ la probabilité pour que x_r appartienne à l'intervalle $[x, x + dx]$. Ces deux probabilités sont égales. Par conséquent, le nombre aléatoire x_r est bien déterminé par la distribution $d(x)$ à travers la largeur de l'intervalle dx .

A.2 La méthode du rejet ou de von Neumann

Il y a cependant des cas où la distribution de probabilité $d(x)$ ne peut être explicitée sur la base de fonctions simples et où, de fait, la détermination du nombre aléatoire x_r par le biais de la relation A.2 n'est pas possible. On fait dans alors appel à la méthode du rejet, ou méthode de von Neumann. Comme le montre la figure A.2, supposons la distribution de

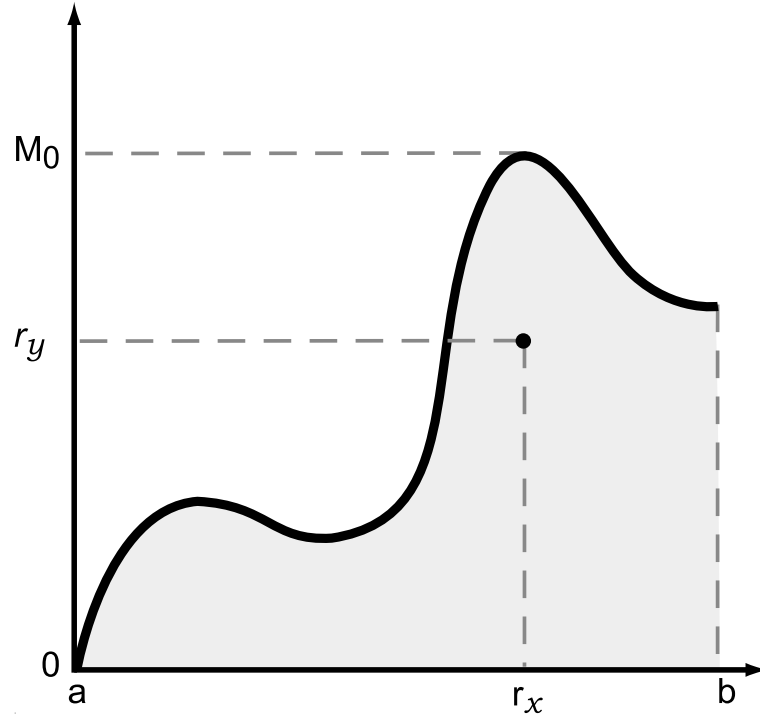


Figure A.2 : Tirage au sort d'un nombre aléatoire à l'aide de la méthode du rejet. Les points de coordonnées (r_x, r_y) se trouvant dans la zone grise sont acceptés et l'on pose $x_r = r_y$. Les points se trouvant dans la zone blanche sont rejetés.

probabilité de la variable x_r limitée par un nombre M_0 de sorte que :

$$d(x_r) \leq M_0 \quad \forall x_r \quad (\text{A.5})$$

La variable x_r est alors déterminée de la façon suivante [Sobol, 1975] :

- Tout d'abord, on tire au sort une variable aléatoire r_x de façon équiprobable dans l'intervalle $[a, b]$.

-
- Une autre variable aléatoire r_y est ensuite générée, elle aussi de façon équiprobable, mais cette fois-ci dans l'intervalle $[0, M_0]$.
 - Enfin, on procède différemment selon les valeurs de r_x et r_y :
 - Dans le cas où $r_y \leq d(r_y)$, on considère le nombre aléatoire x_r comme généré selon la distribution de probabilités $d(x)$ et l'on pose $x_r = r_y$.
 - Par contre, si $r_y < d(r_y)$, le couple (r_x, r_y) est rejeté et l'on recommence la démarche depuis le début.

Annexe B

Algorithmes spécifiques au calcul des variables

B.1 Calcul de la vitesse de dérive

Sommaire

B.1	Calcul de la vitesse de dérive	183
B.2	Calcul de l'énergie moyenne	184
B.3	Calcul de la masse effective moyenne dans la direction du champ électrique	184

À chaque pas, la vitesse $v_i(t)$ de chaque porteur est connue. Par conséquent, la moyenne d'ensemble de la vitesse des électrons à l'instant t est donnée par :

$$\langle v \rangle (t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N v_i(t) \quad (\text{B.1})$$

où N est le nombre de porteurs simulés, et $v_i(t)$ la vitesse du i^{eme} porteur à l'instant t . Par la suite, le calcul de la moyenne temporelle nous donne la vitesse de dérive selon la relation :

$$\bar{v} = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \langle v \rangle (j\Delta t) \quad (\text{B.2})$$

où M est le nombre total de pas sur le temps et Δt le pas sur le temps.

B.2 Calcul de l'énergie moyenne

À chaque pas de la simulation on peut avoir accès aux énergies respectives des différents porteurs. La relation

$$\langle \epsilon \rangle (t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \epsilon_i(t) \quad (\text{B.3})$$

où N est le nombre de porteurs, et $\epsilon_i(t)$ l'énergie du i^{eme} porteur au temps t , nous donne la moyenne d'ensemble de l'énergie des porteurs à l'instant t . Le calcul de la moyenne temporelle nous donne ensuite l'énergie moyenne des porteurs selon la relation :

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \langle \epsilon \rangle (j\Delta t) \quad (\text{B.4})$$

où M est le nombre total de pas sur le temps et Δt le pas sur le temps.

B.3 Calcul de la masse effective moyenne dans la direction du champ électrique

Par définition, la masse effective de chaque électron m_e^* vérifie la relation :

$$\frac{1}{m_e^*} = \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial p_x^2} \quad (\text{B.5})$$

pour un champ électrique appliqué dans la direction x . En remarquant que :

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k} \quad (\text{B.6})$$

on tire de la relation (1.12) (page 26) :

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m_c} = \epsilon(1 + \alpha\epsilon) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m_c} \quad (\text{B.7})$$

où p_x, p_y et p_z sont les coordonnées de \mathbf{p} respectivement selon les axes x, y et z . En multipliant les deux membres par l'expression

$$\frac{\partial}{\partial p_x} dp_x \quad (\text{B.8})$$

il vient que

$$\frac{1}{m_c} p_x dp_x = (1 + 2\alpha\epsilon) d\epsilon \quad (\text{B.9})$$

De fait :

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial p_x} = \frac{p_x}{m_c(1 + 2\alpha\epsilon)} \quad (\text{B.10})$$

En dérivant une seconde fois selon p_x , on obtient

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial p_x^2} &= \frac{1}{m_c(1 + 2\alpha\epsilon)} - \frac{2\alpha p_x}{m_c(1 + 2\alpha\epsilon)^2} \frac{\partial \epsilon}{\partial p_x} \\ &= \frac{1}{m_c(1 + 2\alpha\epsilon)} - \frac{2\alpha p_x}{m_c(1 + 2\alpha\epsilon)^2} \times \frac{p_x}{m_c(1 + 2\alpha\epsilon)} \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Soit, en factorisant :

$$\frac{1}{m_e^*} = \frac{1}{m_c(1 + 2\alpha\epsilon)} \left[1 - \frac{2\alpha p_x^2}{m(1 + 2\alpha\epsilon)^2} \right] \quad (\text{B.12})$$

À chaque pas de la simulation nous calculons la masse effective m_e^* de chaque électron à l'aide de la relation (B.12). Le calcul de la moyenne temporelle

$$\langle m_e^* \rangle(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N m_{e_i}^*(t) \quad (\text{B.13})$$

où N est le nombre de porteurs, et $m_{e_i}^*(t)$ la masse effective du i^{eme} porteur au temps t , nous donne la masse effective moyenne des électrons à l'instant t . Le calcul de la moyenne temporelle nous donne ensuite la masse effective moyenne électronique dans la direction du champ électrique selon la relation :

$$m^* = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \langle m_e^* \rangle(j\Delta t) \quad (\text{B.14})$$

où M est le nombre total de pas sur le temps et Δt le pas sur le temps.

Annexe C

Méthode d'expression analytique de la mobilité différentielle en fréquence

Dans le cas d'une perturbation petit-signal, si l'on ne considère que la direction x correspondant à la direction du champ électrique, le champ électrique appliqué au matériau peut s'écrire sous la forme :

$$E = E_i + \delta E \xi(t) \quad (\text{C.1})$$

où E_i est le champ initial et $\delta E \xi(t)$ la perturbation dans le temps. La réponse de l'énergie s'écrit alors :

$$\epsilon = \epsilon_i + \delta \epsilon \quad (\text{C.2})$$

où $\delta \epsilon$ est très petit devant ϵ , et celle de la vitesse peut être développée sous la forme :

$$v = v_i + \frac{\partial v}{\partial \epsilon} \delta \epsilon = v_i + \delta v \quad (\text{C.3})$$

En faisant un développement limité au premier ordre et en négligeant les termes d'ordre 2, les équations hydrodynamiques (2.102) et (2.103) (page 85) sont ramenées à :

$$\frac{d}{dt}\delta v(t) = -\nu_v\delta v(t) + \left(eE\frac{\partial m^{*-1}}{\partial \epsilon} - v\frac{\partial \nu_v}{\partial \epsilon} \right) \delta \epsilon(t) + e m^{*-1} \delta E\xi(t) \quad (\text{C.4})$$

et

$$\frac{d}{dt}\delta \epsilon(t) = eE\delta v(t) - \left(\nu_\epsilon + \frac{\partial \nu_\epsilon}{\partial \epsilon}(\epsilon - \epsilon_{\text{th}}) \right) \delta \epsilon(t) + e v \delta E\xi(t) \quad (\text{C.5})$$

Si l'on remplace les taux de relaxation par leurs expressions à partir des équations (2.55) et (2.56) (page 65), alors ces relations deviennent :

$$\frac{d}{dt}\delta v(t) = -\nu_v\delta v(t) + \nu_v\frac{\mu' - \mu}{\mu'_\epsilon}\delta \epsilon(t) + e m^{*-1} \delta E\xi(t) \quad (\text{C.6})$$

et

$$\frac{d}{dt}\delta \epsilon(t) = eE\delta v(t) - e E \frac{\mu' + \mu}{\mu'_\epsilon}\delta \epsilon(t) + e v \delta E\xi(t) \quad (\text{C.7})$$

où $\mu = v/E$ est la mobilité de corde statique, $\mu' = dv/dE$ la mobilité différentielle statique, et où $\mu'_\epsilon = d\epsilon/dE$. Ce système se ramène à une équation différentielle matricielle, donnée par :

$$\frac{d}{dt}\Delta(t) = \Gamma_R\Delta(t) + \Gamma_E e \delta E\xi(t) \quad (\text{C.8})$$

où

$$\Delta(t) = \begin{bmatrix} \delta v(t) \\ \delta \epsilon(t) \end{bmatrix} \quad (\text{C.9})$$

et

$$\Gamma_E = \begin{bmatrix} m^{*-1} \\ v \end{bmatrix} \quad (\text{C.10})$$

et

$$\Gamma_R = \begin{bmatrix} \gamma_{vv} & \gamma_{v\epsilon} \\ \gamma_{\epsilon v} & \gamma_{\epsilon\epsilon} \end{bmatrix} \quad (\text{C.11})$$

avec

$$\begin{aligned} \gamma_{vv} &= -\nu_v \\ \gamma_{v\epsilon} &= \nu_v \frac{\mu' - \mu}{\mu'_\epsilon} \\ \gamma_{\epsilon v} &= eE \\ \gamma_{\epsilon\epsilon} &= -eE \frac{\mu' + \mu}{\mu'_\epsilon} \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

La solution de l'équation (C.8) dépend directement de la matrice Γ_R . En effet, elle est donnée par l'expression :

$$\Delta(t) = \exp(\Gamma_R t) \left(\Delta(0) + \int_0^t \exp(-\Gamma_R t') \Gamma_E e \delta E \xi(t') dt' \right) \quad (\text{C.13})$$

De fait, Γ décrit la relaxation de la vitesse et de l'énergie, d'où son nom de *matrice de relaxation*. De même que pour l'équation (4.3), la théorie de la réponse linéaire nous permet d'écrire [Price, 1982] :

$$\Delta(t) = e \delta E \int_0^t K(s) \xi(t-s) ds \quad (\text{C.14})$$

avec

$$K(s) = \begin{bmatrix} K_v(s) \\ K_\epsilon(s) \end{bmatrix} \quad (\text{C.15})$$

où K_ϵ est la fonction de réponse de l'énergie. En posant $\Delta(0) = 0$ dans (C.8), alors on obtient :

$$\Delta(t) = \exp(\Gamma_R t) \int_0^t \exp(-\Gamma_R t') \Gamma_E e \delta E \xi(t') dt' \quad (\text{C.16})$$

que l'on peut ramener à

$$\Delta(t) = \int_0^t \exp[\Gamma_R(t-t')] \Gamma_E e^{\delta E} \xi(t') dt' \quad (\text{C.17})$$

On procède alors à un changement de variable, et en posant $s = t - t'$ l'équation (C.17) devient :

$$\Delta(t) = \int_0^t \exp(\Gamma_R s) \Gamma_E e^{\delta E} \xi(t-s) ds \quad (\text{C.18})$$

Par identification avec la relation (C.14), il vient que :

$$K(s) = \exp(\Gamma_R s) \Gamma_E \quad (\text{C.19})$$

Par conséquent, il suffit d'étudier la matrice Γ pour obtenir des informations sur l'évolution dans le temps de la perturbation et, de fait, sur la fonction de réponse de la vitesse $K_v(s)$. Dans ce but, on diagonalise la matrice Γ afin d'extraire ses valeurs propres λ_+ et λ_- . Elles sont obtenues en résolvant l'équation :

$$\det |\Gamma_R - \lambda I| = 0 \quad (\text{C.20})$$

où I est la matrice identité, et de fait s'expriment par :

$$\lambda_{\pm} = \lambda_R \pm D_R \quad (\text{C.21})$$

avec

$$\lambda_R = \frac{\gamma_{vv} + \gamma_{\epsilon\epsilon}}{2} \quad (\text{C.22})$$

et

$$D_R^2 = \frac{(\gamma_{vv} - \gamma_{\epsilon\epsilon})^2}{4} + \gamma_{v\epsilon} \gamma_{\epsilon v} \quad (\text{C.23})$$

Comme Γ_R est une matrice carrée 2×2 , ses valeurs propres peuvent être réelles (lorsque

$D_R^2 \geq 0$) ou bien complexes conjuguées (lorsque $D_R^2 < 0$). Dans ce dernier cas, elles vérifient :

$$\lambda_{\pm} = \lambda_R \pm i\omega_0 \quad (\text{C.24})$$

avec $\omega_0 = \sqrt{-D_R^2}$.

Ces valeurs propres λ_+ et λ_- correspondent aux taux de relaxation généralisés [Varani *et al.*, 1995] qui vont déterminer le comportement dans le temps de la fonction de réponse $K_v(s)$, et qui, comme les valeurs propres, pourront être réels ou complexes. On définit :

$$\nu_{\pm} = -\lambda_{\mp} \quad (\text{C.25})$$

pour le cas réel et

$$\nu_R = -\lambda_R \quad (\text{C.26})$$

associé à ω_0 pour le cas complexe.

Exprimons à présent la fonction de réponse à partir de ces grandeurs. Si l'on appelle L_R la matrice diagonale des valeurs propres de Γ_R , alors on peut écrire que :

$$\Gamma_R = S L_R S^{-1} \quad (\text{C.27})$$

où S est la matrice de transformation, exprimant les vecteurs propres de Γ_R dans la base initiale. Par conséquent :

$$\exp(\Gamma_R t) = S \begin{pmatrix} \exp(\lambda_+ t) & 0 \\ 0 & \exp(\lambda_- t) \end{pmatrix} S^{-1} \quad (\text{C.28})$$

En calculant les éléments de S et de S^{-1} et en les substituant dans l'équation précédente, on

obtient [Gruzinskis *et al.*, 1993] :

$$\exp(\Gamma_R t) = \frac{1}{2D_R} \begin{pmatrix} e_{11} & e_{12} \\ e_{21} & e_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{C.29})$$

avec

$$\begin{aligned} e_{11} &= (\gamma_{vv} - \lambda_-) \exp(\lambda_+ t) - (\gamma_{vv} - \lambda_+) \exp(\lambda_- t) \\ e_{12} &= \gamma_{v\epsilon} [\exp(\lambda_+ t) - \exp(\lambda_- t)] \\ e_{21} &= \frac{(\gamma_{vv} - \lambda_+)(\gamma_{vv} - \lambda_-)}{\gamma_{v\epsilon}} [\exp(\lambda_+ t) - \exp(\lambda_- t)] \\ e_{22} &= (\gamma_{vv} - \lambda_+) \exp(\lambda_+ t) - (\gamma_{vv} - \lambda_-) \exp(\lambda_- t) \end{aligned} \quad (\text{C.30})$$

À partir des équations (C.19), (C.29) et (C.30), on exprime la fonction de réponse de la vitesse $K_v(s)$ par :

$$K_v(s) = K^+ \exp(-\nu_+ s) + K^- \exp(-\nu_- s) \quad (\text{C.31})$$

dans le cas de valeurs propres réelles et par :

$$K_v(s) = m^{*-1} \exp(-\nu_R s) \times \left(\cos(\omega_0 s) + \frac{A - \nu_R}{\omega_0} \sin(\omega_0 s) \right) \quad (\text{C.32})$$

dans le cas de valeurs propres complexes, où

$$K^\pm = \mp \frac{A - \nu_\pm}{2m^* D_R} \quad (\text{C.33})$$

avec

$$A = \frac{2 e E \mu'}{\mu'_\epsilon} \quad (\text{C.34})$$

Suivant que les valeurs propres sont réelles ou complexes, la fonction de réponse de la vitesse prend des formes différentes :

- Dans le cas où les valeurs propres sont réelles, la fonction de réponse s'écrit comme la somme de deux exponentielles en ν_+ et ν_- , pondérées respectivement par les termes K^+ et K^- .
- Dans le cas où les valeurs propres sont complexes, la fonction de réponse s'écrit comme le produit entre un terme d'oscillation et un terme d'amortissement.

La mobilité différentielle en fréquence est déduite de K_v à travers la relation (4.5) (page 141). Elle est donnée par :

$$\mu'(\omega) = \left[\frac{e\nu_+ K^+}{\nu_+^2 + \omega^2} + \frac{e\nu_- K^-}{\nu_-^2 + \omega^2} \right] + j \left[-\frac{e\omega K^+}{\nu_+^2 + \omega^2} - \frac{e\omega K^-}{\nu_-^2 + \omega^2} \right] \quad (\text{C.35})$$

dans le cas où les taux de relaxation sont réels, et par

$$\mu'(\omega) = \frac{e}{m^*} \left[\frac{A(\nu_R^2 + \omega_0^2) - \omega^2(A - 2\nu_R)}{[\nu_R^2 + (\omega_0 - \omega)^2][\nu_R^2 + (\omega_0 + \omega)^2]} + j \frac{\omega(\nu_R^2 + \omega_0^2 - \omega^2 - 2\nu_R A)}{[\nu_R^2 + (\omega_0 - \omega)^2][\nu_R^2 + (\omega_0 + \omega)^2]} \right] \quad (\text{C.36})$$

lorsqu'ils sont complexes.

Bibliographie

- [Ali Omar et Reggiani, 1987] ALI OMAR, M. et REGGIANI, L. “Drift and diffusion of charge carriers in silicon and their empirical relation to the electric field”. *Solid-St. Electron.*, **30**(7), 693–697 (1987).
- [Ashcroft et Mermin, 1976] ASHCROFT, N. W. et MERMIN, N. D., editors. “Solid state physics”. Saunders College, Philadelphia, USA (1976). ISBN 0-03-049346-3.
- [Aubert *et al.*, 1984] AUBERT, J. P., VAISSIÈRE, J. C., et NOUGIER, J. P. “Matrix determination of the stationary solution of the Boltzmann equation for hot carriers in semiconductors”. *J. Appl. Phys.*, **56**(4), 1128 (1984).
- [Badoual *et al.*, 1993] BADOUAL, R., MARTIN, C., et JACQUET, S. “Micro-ondes”. Masson (1993). ISBN 2-225-84023-7.
- [Beattie, 1962] BEATTIE, A. R. *J. Phys. Chem. Solids*, **24**, 1049 (1962).
- [Budd, 1966] BUDD, H. *J. Phys. Soc. Jpn. Suppl.*, **21**, 420 (1966).
- [Canali *et al.*, 1996] CANALI, C., PAVAN, P., DI CARLO, A., LUGLI, P., MALIK, R., MANFREDI, M., NEVIANI, A., VENDRAME, L., ZANONI, E., et ZANDLER, G. “Experimental and Monte Carlo analysis of impact-ionization in AlGaAs/GaAs HBT’s”. *IEEE Trans. Electron Devices*, **43**(11), 1769 (1996).
- [Capper, 1994] CAPPER, P., editor. “Narrow Gap Cadmium-based Compounds”. INSPEC, The Institution of Electrical Engineers, London, United Kingdom (1994). ISBN 0-85296-880-9.

-
- [Case, 1917] CASE, T. “Notes on the change of resistance of certain substrates in light”. *Physics Reviews*, **9**, 305–310 (1917).
- [Cavassilas, 2000] CAVASSILAS, N. (2000). “Etude du phénomène d’ionisation par choc dans les semi-conducteurs III-V : application aux transistors à effet de champ”. Thèse, I.E.F. Orsay.
- [Cavassilas *et al.*, 2001] CAVASSILAS, N., ANIEL, F., BOUJDARIA, K., et FISHMAN, G. “Energy-band structure of GaAs and Si : a sps* k.p method”. *Phys. Rev. B*, **64**, 115207 (2001).
- [Conwell et Vassel, 1968] CONWELL, E. M. et VASSEL, M. O. “High-field transport in n -type GaAs”. *Phys. Rev.*, **166**, 797 (1968).
- [de Melo et al., 1989] DE MELO ET AL., O. *J. Cryst. Growth*, **98**, 704 (1989).
- [Degauque et Hamelin, 1990] DEGAUQUE, P. et HAMELIN, J. “Compatibilité électromagnétique”. Dunod (1990). ISBN 2-04-018807-X.
- [Destéfanis, 1991] DESTÉFANIS, G. “HgCdTe infrared diode arrays”. *Semicond. Sci. Technol.*, **6**, C88–C92 (1991).
- [Destéfanis, 1998] DESTÉFANIS, G. “Comment observer l’invisible?”. *Clefs CEA*, **40** (1998).
- [Dmitriev et Mocker, 1995] DMITRIEV, A. V. et MOCKER, M. “Recombination and ionization in narrow gap semiconductors”. *Phys. Rep.*, **257**, 85 (1995).
- [Dornhaus *et al.*, 1976] DORNHAUS, R., NIMTZ, G., et RICHTER, W. “The properties and application of the $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ alloy system”. Dans *Springer Tracts in Modern Physics Vol. 78*. Springer-Verlag, Berlin (1976).
- [Dubowski *et al.*, 1980] DUBOWSKI, J. J., DIETL, T., SZYMANSKA, W., et GALAZKA, R. R. “Electron scattering in $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ”. *J. Phys. Chem. Solids*, **42**, 351 (1980).
- [Fadel, 1988] FADEL, M. (1988). “Méthodes de résolution de l’équation de Boltzmann en régime de porteurs chauds dans les semiconducteurs composés III-V”. Thèse, Université
-

Montpellier II.

- [Fawcett *et al.*, 1970] FAWCETT, W., BOARDMAN, D. A., et SWAIN, S. "Monte Carlo determination of electron transport properties in gallium arsenide". *J. Phys. Chem. Solids*, **31**, 1963 (1970).
- [Gaussorgues, 1999] GAUSSORGUES, G. "La thermographie infrarouge". Tec & Doc, Paris, 4 edition (1999). ISBN 2-7430-0290-5.
- [Gelmont *et al.*, 1992a] GELMONT, B., KIM, K., et SHUR, M. "Theory of impact ionization in $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ". *Phys. Rev. Lett.*, **69**(8), 1280 (1992).
- [Gelmont *et al.*, 1992b] GELMONT, B., LUND, B., KIM, K., JENSEN, G. U., SHUR, M., et FJELDLY, T. A. "Monte Carlo simulation of electron transport in mercury-cadmium-telluride". *J. Appl. Phys.*, **71**(10), 4977 (1992).
- [Godefroy, 1965] GODEFROY, L. "Éléments de statistique quantique appliquée à la thermodynamique isotherme". Dunod, Paris (1965).
- [Gordon *et al.*, 1993] GORDON, N. T., BARTON, S., CAPPER, P., JONES, C. L., et MEDCALFE, N. *Semicond. Sci. Technol.*, **8**, S221 (1993).
- [Graft, 1982] GRAFT, R. D. "Localized orbital description of the electronic structure of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ pseudobinary alloys". *J. Vac. Sci. Technol*, **21**(1), 146 (1982).
- [Grubin *et al.*, 1988] GRUBIN, H. L., FERRY, D. K., et JACOBONI, C., editors. "The Physics of Submicron Semiconductor Devices". Plenum, New York (1988).
- [Gruzinskis *et al.*, 1993] GRUZHINSKIS, V., STARIKOV, E., SHIKTOROV, P., REGGIANI, L., SARANITI, M., et VARANI, L. "Hydrodynamic analysis of DC and AC hot-carrier transport in semiconductors". *Semicond. Sci. Techn.*, **8**, 1283 (1993).
- [Hamaguchi, 2001] HAMAGUCHI, C. "Basic semiconductor physics". Springer-Verlag, Berlin (2001). ISBN 3-540-41639-0.
- [Hansen *et al.*, 1982] HANSEN, G. L., SCHMIT, J. L., et CASSELMAN, T. N. "Energy gap

-
- versus alloy composition and temperature in $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ". *J. Appl. Phys.*, **53**(10), 7099 (1982).
- [Harrison et Hauser, 1976] HARRISON, J. W. et HAUSER, J. R. "Alloy scattering in ternary III-V compounds". *Phys. Rev. B*, **13**(12), 5347–5350 (1976).
- [Higgins *et al.*, 1989] HIGGINS, W. M., PULTZ, G. N., ROY, R. G., LANCASTER, R. A., et SCHMIT, J. L. *J. Vac. Sci. Technol. A*, **7**, 271 (1989).
- [Hlou, 1993] HLOU, L. (1993). "Nouvelles techniques de résolution de l'équation de Boltzmann pour la détermination du bruit dans les semiconducteurs". Thèse, Université Montpellier II.
- [Hylands *et al.*, 1986] HYLANDS, M. J., THOMPSON, J., BEVAN, M. J., WOODHOUSE, K. T., et VINCENT, V. *J. Vac. Sci. Technol. A*, **4**, 2217 (1986).
- [Jacoboni et Reggiani, 1983] JACOBONI, C. et REGGIANI, L. "The Monte Carlo method for the simulation of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials". *Reviews of Modern Physics*, **55**(3), 645 (1983).
- [Johnson *et al.*, 1988] JOHNSON, N. F., HUI, P. M., et EHRENREICH, H. "Valence-band-offset controversy in HgTe/CdTe superlattices : A possible resolution". *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 1993 (1988).
- [Katsuki et Kunimune, 1971] KATSUKI, S. et KUNIMUNE, M. "The band structure of alloy structures of alloy system $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ calculated by the pseudopotential method". *J. Phys. Soc. Japan*, **31**(2), 415 (1971).
- [Keldysh, 1965] KELDYSH, L. V. *Sov. Phys. JETP*, **21**, 1135 (1965).
- [Kim, 1993] KIM, K. (1993). "Electron transport in novel semiconductors". Thèse, University of Virginia.
- [Komater *et al.*, 1992] KOMETER, K., ZINDLER, G., et VOGL, P. "Lattice-gas cellular-automaton method for semiclassical transport in semiconductors". *Phys. Rev. B*, **46**(3), 1382–1394 (1992).
-

- [Kruse, 1981] KRUSE, P. K. “The emergence of $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ as a modern infrared sensitive material”. Dans WILLARDSON, R. K. et BEER, A., editors, *Semiconductors and Semimetals*, volume 18. Academic Press, New York (1981). ISBN 0-12-752118-6.
- [Kuhn *et al.*, 1990] KUHN, T., REGGIANI, L., et VARANI, L. “Correlation functions and electronic noise in doped semiconductors”. *Phys. Rev. B.*, **42**, 11133 (1990).
- [Kurosawa, 1966] KUROSAWA, T. *J. Phys. Soc. Jpn. Suppl.*, **21**, 424 (1966).
- [Lawson *et al.*, 1959] LAWSON, NIELSEN, W., PUTLEY, E. H., et YOUNG, A. S. “Preparation and properties of HgTe and mixed crystals of HgTe-CdTe ”. *J. Phys. Chem. Solids*, **9**, 325–329 (1959).
- [Long et Schmit, 1970] LONG, D. et SCHMIT, J. L. “Mercury-cadmium-telluride and closely related alloys”. Dans WILLARDSON, R. K. et BEER, A. C., editors, *Semiconductor and Semimetals*, volume 18, chapter 5, page 175. Academic Press, New York (1970).
- [Lugli et Ferry, 1985] LUGLI, P. et FERRY, D. K. “Degeneracy in the ensemble Monte Carlo method for high-field transport in semiconductors”. *IEEE Trans. Electron Devices*, **ED-32**(11), 2431 (1985).
- [Mathieu, 2001] MATHIEU, H. “Physique des semiconducteurs et des composants électroniques”. Dunod, 5e edition (2001).
- [McQuarrie, 1976] MCQUARRIE, A. “Statistical Mechanics”. Harper and Row, New York (1976).
- [Miles, 1994] MILES, R. W. “Electron and hole effective masses in HgCdTe ”. Dans *Narrow Gap Cadmium-based Compounds*, pages 215–220. INSPEC, The Institution of Electrical Engineers, London, United Kingdom (1994).
- [Mouton, 1996] MOUTON, O. (1996). “Modèle de structures de bande et transport électronique en champ fort dans les semiconducteurs III-V. Application aux matériaux GaAs et InP ”. Thèse, Université de Lille.

-
- [Nimtz *et al.*, 1974] NIMTZ, G., DORNHAUS, R., et MÜLLER, K. H. “Transient carrier decay and transport properties in $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ”. *Phys. Rev. B*, **10**(8), 3302 (1974).
- [Nougier, 1991] NOUGIER, J. “Noise in devices : definition, modelling”. Dans NOUGIER, J. P., editor, *III-V microelectronics*, pages 183–238. Elsevier (1991).
- [Orsal, 1986] ORSAL, B. (1986). “Les photodiodes à avalanche dans le HgCdTe à $\lambda = 1.3 \mu\text{m}$ et $1.55 \mu\text{m}$: étude physique et caractérisation optoélectronique”. Thèse, Université Montpellier II.
- [Petersen, 1981] PETERSEN, P. E. “Auger recombination in mercury-cadmium-telluride”. Dans WILLARDSON, R. K. et BEER, A., editors, *Semiconductors and Semimetals*, volume 18. Academic Press, New York (1981). ISBN 0-12-752118-6.
- [Peyrard, 2003] PEYRARD, J. C. “Prospective sur les besoins ’défense’ en détecteurs infrarouge”. *C. R. Physique*, **4**(10), 1077–1082 (2003).
- [Price, 1982] PRICE, P. J. *J. Appl. Phys.*, **53**, 8805 (1982).
- [Rees, 1968] REES, H. D. “Calculation of steady state distribution functions by exploiting stability”. *Physics Letters*, **26A**(9), 416 (1968).
- [Reggiani, 1985] REGGIANI, L. “Hot-electron transport in semiconductors”. Springer, Berlin (1985).
- [Richard, 2004] RICHARD, S. (2004). “Structure de bande du $\text{Hg}_{0.8}\text{Cd}_{0.2}\text{Te}$ ”. Communication privée.
- [Ridley, 1999] RIDLEY, D. K. “Quantum processus in semiconductors”. Oxford University Press, New York, 4 edition (1999). ISBN 0-19-850579-5.
- [Rogalski, 2003] ROGALSKI, A. “Infrared detectors : status and trends”. *Progress in Quantum Electronics*, **27**, 59–210 (2003).
- [Ruch, 1972] RUCH, J. G. “Electron dynamics in short-channel field effect transistors”. *IEEE Trans. Electron Devices*, **ED-19**, 652–659 (1972).
-

- [Sangla *et al.*, 1988] SANGLA, S. P. S., RINN, L. M., et NICHOLLS, R. E. *J. Cryst. Growth*, **88**(1), 107 (1988).
- [Scott, 1971] SCOTT, W. "Electron mobility in $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$ ". *J. Appl. Phys*, **43**(3), 1055 (1971).
- [Shockley *et al.*, 1966] SHOCKLEY, W., COPELAND, J. A., et P., J. R. "Quantum theory of atoms, molecules and the solid state". Academic, New York (1966).
- [Shur, 1976] SHUR, M. *Electron Lett.*, **12**, 615 (1976).
- [Sivananthan *et al.*, 1988] SIVANANTHAN, S., LANGE, M. D., MONFREY, G., et FAURIE, J. P. *J. Vac. Sci. Technol. B*, **6**, 788 (1988).
- [Snowden, 1986] SNOWDEN, C. M. "Introduction to semiconductor device modelling". World Scientific (1986). ISBN 9971-50-142-2.
- [Sobol, 1975] SOBOL, I. M. "The Monte Carlo Method". Mir Publishers, Moscow (1975).
- [Stöcker *et al.*, 1999] STÖCKER, H., F., J., et GUILLAUME, G. "Toute la physique". Dunod, 2 edition (1999). ISBN 2-10-003942-3.
- [Vaissière, 1986] VAISSIÈRE, J. C. (1986). "Étude du régime de porteurs chauds dans le silicium de type p ". Thèse, Université Montpellier II.
- [Vaissière *et al.*, 1994] VAISSIÈRE, J. C., NOUGIER, J. P., VARANI, L., HOULET, P., HLOU, L., STARIKOV, E., SHIKTOROV, P., et REGGIANI, L. "Small-signal analysis of the boltzmann equation from harmonic- and impulse-response methods". *Phys. Rev. B*, **49**(16), 49 (1994).
- [Varani et Reggiani, 1994] VARANI, L. et REGGIANI, L. "Microscopic theory of electronic noise in semiconductor unipolar structures". Dans *La rivista del nuovo cimento*, volume 17 de 3 (1994).
- [Varani *et al.*, 1995] VARANI, L., VAISSIÈRE, J. C., NOUGIER, J. P., HOULET, P., REGGIANI, L., STARIKOV, E., SHIKTOROV, P., GRUZHINSKIS, V., et HLOU, L. "A model

hyperfrequency differential-mobility for nonlinear transport in semiconductors”. *J. Appl. Phys.*, **77**(2), 665–675 (1995).

[Yoo et Kwack, 1997] YOO, S. D. et KWACK, K. D. “Theoretical calculation of electron mobility in HgCdTe”. *J. Appl. Phys.*, **81**(2), 719 (1997).

[Yu et Cardona, 2001] YU, P. Y. et CARDONA, M. “Fundamentals of Semiconductors : Physics and Materials Properties”. Springer Verlag, Berlin (2001). ISBN 3-540-41323-5.

Liste des titres et travaux

1 Communications relatives à ces travaux de thèse

Publications dans des revues

- Christophe Palermo, Luca Varani, Jean-Claude Vaissière, “*Monte Carlo analysis of high-frequency non-equilibrium transport in Mercury-Cadmium-Telluride for infrared detection*”, Semicond. Sci. Technol., **19**, S443-S445 (2004).

Congrès, conférences, workshops, avec proceedings

- Christophe Palermo, Luca Varani, Jean-Claude Vaissière, “*Effets des micro-ondes sur les photodétecteurs infrarouges*”, Doctiss, 2 Mars 2004, Montpellier, France (session orale).
- Christophe Palermo, Luca Varani, Jean-Claude Vaissière, “*Monte Carlo and Semi-Analytical Approaches to Non-Equilibrium High-Frequency Transport in Narrow-Gap Semiconductors : Application to Mercury-Cadmium-Telluride*”, MSED 2003 – 14th Workshop on Modelling and Simulation of Electron Devices, 16-17 Octobre 2003, Barcelone, Espagne, (session orale).
- Christophe Palermo, Luca Varani, Jean-Claude Vaissière, “*Modélisation semi-analytique de la mobilité hyperfréquence en régime de porteurs chauds : application au $Hg_{0.8}Cd_{0.2}Te$* ”, Journées Nationales Micro-ondes (JNM), 21 - 23 Mai 2003, Lille, France (session orale).
- Christophe Palermo, Luca Varani, Jean-Claude Vaissière, “*Méthodes de simulation de l’ionisation par impact et de la multiplication électronique dans les semiconducteurs à applications optoélectroniques : Application au $Hg_{0.8}Cd_{0.2}Te$* ”, Journées Nationales du

Réseau Doctoral de Micro-électronique (JNRDM), 14-16 Mai 2003, Toulouse, France (session poster).

Congrès, conférences, workshops sans proceedings

- Christophe Palermo, Luca Varani, Jean-Claude Vaissière, “*Étude hydrodynamique de l’influence des micro-ondes sur les processus de génération-recombinaison dans le HgCd-Te*”, Xèmes Journées Nationales de la Microélectronique et de l’Optoélectronique (JNMO), 8 - 11 Juin 2004, La Grande Motte, France (session Poster).
- Christophe Palermo, Luca Varani, Jean-Claude Vaissière, “*Monte Carlo analysis of high-frequency non-equilibrium transport in Mercury-Cadmium-Telluride for infrared detection*”, HCIS 13 – 13th International Conference on Nonequilibrium Carrier Dynamics in Semiconductors, 28 Juillet - 2 Août 2003, Modena, Italie (session poster).
- Christophe Palermo, Luca Varani, Jean-Claude Vaissière, “*Modélisation Microscopique du transport dans les semiconducteurs à petits gaps utilisés en optoélectronique : Application au $Hg_{0.8}Cd_{0.2}Te$* ”, Journées Nationales de la Microélectronique et de l’Optoélectronique (JNMO), 29 septembre - 2 octobre 2002, St Aygulf, France (session poster).
- Christophe Palermo, Luca Varani, Jean-Claude Vaissière, “*Évaluation des effets d’une onde hyperfréquence de forte puissance sur le transport électronique dans le tellurure de mercure et de cadmium utilisé pour la détection de l’infrarouge lointain*”, Journée des Doctorants D.G.A., 6 mars 2002, Paris (session poster).

2 Communications annexes

Publications dans des revues

- L. Hlou, K. Amechnoue, J. Diyadi, A. Achachi, M. Samri J-P. Nougier, J-C. Vaissière, L. Varani, C. Palermo, J-F. Millithaler, “*The Scattered Packet Method for the simulation of transport phenomena in semiconductors*”, soumis à Recent Research Advances in Science and Technology of Semiconductors.

- A. Greiner, L. Varani, C. Palermo, J. C. Vaissière, L. Reggiani, “*Avoiding Spurious Velocity Overshoots In Hydrodynamic Simulations of Deep-Submicron Devices by a Physical Modelling of Heat Transport*”, Semicond. Sci. Technol., **19**, S142-S144 (2004).

Congrès, conférences, workshops, avec proceedings

- S. Pérez, T. González, E. Starikov, P. Shiktorov, V. Gružinskis, L. Reggiani, L. Varani, C. Palermo, J. C. Vaissière, “*Étude Monte Carlo de diodes Schottky nanométriques pour la génération TeraHertz*”, 22èmes Journées Nationales d’Optique Guidée (JNOG), 12-13-14 Novembre 2003, Valence, France (session poster).
- E. Starikov, P. Shiktorov, V. Gružinskis, L. Varani, C. Palermo, J. C. Vaissière, L. Reggiani, “*Modélisation de la génération TeraHertz dans les dispositifs à base de nitrures*”, 22èmes Journées Nationales d’Optique Guidée (JNOG), 12-13-14 Novembre 2003, Valence, France (session poster).
- A. Greiner, L. Varani, C. Palermo, J. C. Vaissière, L. Reggiani, “*Heat Transport and Spurious Velocity Overshoots in Moment-Based Simulations of Deep-Submicron Devices*”, MSED 2003 – 14th Workshop on Modelling and Simulation of Electron Devices, 16-17 Octobre 2003, Barcelone, Espagne (session orale).
- L. Varani, C. Palermo, J. C. Vaissière, P. Shiktorov, E. Starikov, V. Gruzhinskis, L. Reggiani, S. Pérez, T. González, “*A Monte approach to current fluctuations under high-frequency large-amplitude cyclostationary conditions*”, MSED 2003 – 14th Workshop on Modelling and Simulation of Electron Devices, 16-17 Octobre 2003, Barcelone, Espagne, (session orale).

Congrès, conférences, workshops sans proceedings

- C. de Vasconcelos, C. Palermo, J.F. Millithaler, J.C. Vaissière, L. Varani, “*Étude de la suppression du bruit de diffusion dans le Si-n*”, Action Spécifique Bruit, 7 et 8 juin 2004, La Grande Motte, France (session poster).
- L. Varani, C. Palermo, J.C. Vaissière, “*A Monte Carlo approach to electronic noise in*

cyclostationary conditions”, Action Spécifique Bruit, 7 et 8 juin 2004, La Grande Motte, France (session poster).

- E. Starikov, P. Shiktorov, V. Gruzinskis, L. Varani, J.C. Vaissière, C. Palermo, L. Reggiani “*Monte Carlo simulations of velocity noise in bulk nitrides*”, Action Spécifique Bruit, 7 et 8 juin 2004, La Grande Motte, France (session poster).
- T. Contaret, A. Ferron, C. Palermo, L. Varani, J.C. Vaissière, “*Noise modelling with physical approaches for advanced CMOS Devices : Comparison between macroscopic and microscopic simulations*”, Action Spécifique Bruit, 7 et 8 juin 2004, La Grande Motte, France (session orale).
- A. Greiner, L. Varani, C. Palermo, J.C. Vaissière, L. Reggiani, “*Avoiding Spurious Velocity Overshoots In Hydrodynamic Simulations of Deep-Submicron Devices by a Physical Modelling of Heat Transport*”, HCIS 13 – 13th International Conference on Nonequilibrium Carrier Dynamics in Semiconductors, 28 Juillet - 2 Août 2003, Modena, Italie (session poster).

3 Contrats et programmes de collaboration

Action Intégrée GALILEE 2001 (num. 02874RA)

- Mission du 26 mai au 2 juin 2001 à l’Université de Lecce.
- Mission du 16 au 23 décembre 2001 à l’Université de Lecce.
- Mission du 12 au 17 décembre 2002 à l’Université de Lecce.

Programme de coopération avec la Lituanie (num. 12864)

- Mission du 9 au 16 juin 2001 au Physics Institute de Vilnius.
- Mission du 14 au 18 juin 2003 au Physics Institute de Vilnius.

Title

Evaluation of the effects of high-power microwaves on optoelectronic materials : application to $\text{Hg}_{1-x}\text{Cd}_x\text{Te}$.

Abstract

The purpose of this thesis is to evaluate the effects of high-power microwaves on $\text{Hg}_{0.795}\text{Cd}_{0.205}\text{Te}$, a II-VI semiconductor alloy used for the fabrication of infrared photo-detectors operating in the LWIR (Long Wavelegth Infrared) atmospheric window. Since the energy of the microwave photons is too weak to produce directly free carrier photogenerations, they influence the carrier dynamics by inducing an additional electric field within the material.

This study is made through the development of numerical simulation tools which are based on both Monte Carlo and hydrodynamic approaches. The different microscopic collision mechanisms are taken into account as well as the Auger generation-recombination processes which play a major role in this material. Firstly, the physical phenomena influencing the charge transport are analyzed through an investigation of the material behaviour under static electric fields. Then, both small-signal and large-signal regimes are described in order to evaluate the system response to various kind of perturbations. The influence on the electron density of each parameter of the considered waves is then described.

Keywords : HgCdTe , MCT, microwaves, infrared photodetection, Auger generation-recombination, simulation, Monte Carlo, hydrodynamic, electron transport, noise, transient phenomena, pulses, dynamic response.

Résumé

L'objectif de ce travail de thèse est d'évaluer les effets induits par une onde hyperfréquence de forte puissance sur le $\text{Hg}_{0.795}\text{Cd}_{0.205}\text{Te}$, un alliage semiconducteur de type II-VI utilisé pour la fabrication de photodétecteurs infrarouge opérant dans la fenêtre atmosphérique LWIR (Long Wavelength Infrared). L'énergie des photons associés aux micro-ondes étant trop faible pour photo-générer directement des porteurs libres, celles-ci influencent la dynamique des porteurs de charges en induisant un champ électrique additionnel au sein du matériau. Aussi, nous nous intéressons aux différents aspects du comportement électronique du matériau.

Cette étude est menée à travers le développement d'outils numériques de simulation, basés sur la méthode Monte Carlo et sur l'approche hydrodynamique. Les différents mécanismes de collision microscopiques sont pris en compte dans notre modèle, au même titre que les processus de génération-recombinaison Auger qui jouent un rôle capital dans ce matériau. Après avoir mis en évidence, à l'aide d'une étude du matériau en régime statique, les phénomènes physiques intervenant dans le transport de charges ainsi que leurs influences sur celui-ci, nous menons une étude dynamique. La réponse du système à différentes perturbations est alors évaluée à travers la description des régimes petit-signal et grand-signal, et l'influence sur la densité électronique des différents paramètres de chaque type d'onde considéré est mise en évidence.

Mots-clés : HgCdTe, MCT, micro-ondes, hyperfréquences, photodétection infrarouge, génération-recombinaison Auger, simulation, Monte Carlo, hydrodynamique, transport électronique, bruit, phénomènes transitoires, impulsions, réponse dynamique.